GE Healthcare

SWIFT II

取扱説明書

Version 2.0

本書に関するご質問は以下までお願いいたします。

〒169-0073 東京都新宿区百人町 3-25-1 サンケンビルヂング

バイオダイレクトライン

Tel. 03-5331-9336 Fax. 03-5331-9370

GE ヘルスケア バイオサイエンス株式会社

GE Healthcare

GE imagination at work

GE imagination at work

GE imagination at work

GE imagination at work

GE imagination at work

GE imagination at work

1. 概要

1.1 はじめに

Microsoft と International Business Machines Corporations 製品についてこのマニュアルの中で述べられていることは承認されています。

SWIFT II は Windows ィ 95/98/2000 や NT 環境で作動するアプリケーションソフトウエアで、以下のアプリケーションモジュールから構成されていますので、目的に応じたアプリケーションをご使用いただけます。

SWIFT II –METHOD には以下のモジュールが含まれます。

SWIFT II -SCAN　波長スキャン用　（略 WS）
SWIFT II -KIN　酵素カイネティクス用　（略 RK）
SWIFT II -TIME　タイムドライブ用　（略 TD）
SWIFT II -QUANT 定量用　（略 QA）
SWIFT II -MULTI　多波長測定用　（略 MW）
SWIFT II -FRAC　フラクション解析用（略 FA）
SWIFT II –Culture 培養液濁度測定用　(略 CU)
SWIFT II –Tm　Tm 値測定用　（略 Tm）

Instrument Control モジュールは、これらのアプリケーションモジュールのそれぞれにも含まれており、測定をサポートします。ソフトウエアのインストール後、まずこのモジュールの設定を確認し、分光光度計との接続等問題なく作動するか確認してください。

SWIFT II ソフトウエアは ISO9001 認可品質管理システムに適合する設計および製造が行われています。

弊社にて推奨する PC と異なるタイプの PC をご使用の場合、 その PC に適切な操作方法を本文中ご説明いたしかねることがございます。その場合の安全操作とメンテナ

ンスについてはご使用される PC のマニュアルをご覧ください。

このマニュアルは、お客様が Microsoft Windows 95/98/2000 や NT の基本的な知識をお持ちであることを前提としています。各 Microsoft Windows の操作については Microsoft Windows　User's Guide をご覧ください。

1.2 Installation of Software（ソフトウエアのインストール）
すべてのモジュールを（SWIFT II - METHOD）インストールする場合、約 10 メガバイトのディスクスペースを必要とします。

SWIFT II - METHOD のインストール手順

Microsoft Windows 95/98/2000 へのインストール
・PC の CD-ROM ドライブにディスクを挿入します。
・　自動的にインストールを開始します。
・　Welcome メッセージが表示されたら Next をクリックします。
・デフォルトのフォルダ（ディレクトリ）は C:/PROGRAM FILES/SWIFT II/＊＊＊＊です。変更する場合は Browse を、そのまま操作する場合は Next を押してください。
・Set-up ページの Typical を選択し、Next を押します。
・表示される指示に従い、インストールを完了してください。

Microsoft Windows NT へのインストール
PC の CD-ROM ドライブにディスクを挿入します。自動的に使用可能なインストーラー画面が表示されますので、指示に従ってインストールしてください。
もし、他のユーザーのアクセスを可能にする場合、システムのアドミニストレーターに以下のように操作するよう伝えてください。

1. フォルダ（ディレクトリ）をインストーラーのスタートメニューから All Users スタートメニューへ移動してください：
   Winnt/Profiles/”installer”/Start Menu/Programs/****
   Winnt/Profiles/All Users/Start Menu/Programs/
2. 使用権限のある人に許可を与えてください：

Winnt/Profiles/All Users/Programs/****
マウス右側をクリックし、
Properties>Security>Permission>Add>Highlight”All User">Add>OK
の操作をしてください。

SWIFT II-METHOD の PROGRAM FILES フォルダには次のフォルダがインストールされています。

フォルダ名	モジュール	内容
Instument	Instrument	分光光度計コントロールパネル
Wavescan	Wavescan	波長スキャン用
Kinetics	Kinetics	酵素カイネティクス用
TDrive	Tdrive	タイムドライブ用
Quant	Quantity	定量用
Multi	Multi	多波長測定用
Fraction	Fraction	フラクション解析用
Culture	Culture	菌培養液濁度測定
Tm	Tm	Tm 値測定用

1.3 Helpful Hints（役に立つヒント）
以下の点に留意してください：
・アプリケーションの起動には、Main Toolbar を使います。Main Toolbar は、SWIFT II のインストール後、再起動（スタート＞ Windows の終了＞コンピューターを再起動する）すると表示され、画面の上下左右どこにでも固定できます。
・SWIFT II で使用するファイルの種類（Parameter、Data、Method など）を区別しやすくするため、以下の手順で Windows がファイルの拡張子を表示するように設定してください。

スタート＞マイ コンピューター＞表示＞オプション＞表示
「登録されているファイルの拡張子は表示しない」のチェックボックスを OFF にする。

・オンラインヘルプを参照するには、メニュー項目を選択したりダイアログボックスを呼

び出した後で、F1 キーを押すか、またはヘルプアイコンをクリックします。ヘルプの目次が利用できます。
・携帯用コンピューターをお使いの場合は、コンピューターのセットアップでパワーマネージメントシステムが OFF（または NEVER）に設定されていることを確認してください。

1.4 Programme Style（プログラムの形式）

1.4.1 Main Toolbar（メインツールバー）

SWIFT II-METHOD の Main Toolbar は 9 つのボタンで構成され、Instrument Control を含めたすべてのアプリケーションに素早くアクセスできます。Main Toolbar は、SWIFT II のインストール後、再起動（スタート＞Windows の終了＞「コンピューターを再起動する」）すると表示され、画面の上下左右どの端にでも固定できます。また、スタート＞プログラム＞SWIFT II＞SWIFT II を選んで、画面上に呼び出せます。Main Toolbar のオプションは、バーの上でマウスの右ボタンをクリックすると表示されます。
Always on top（常に手前に表示）　ツールバーをすべてのウィンドウの中で常に一番手前に表示します。
Autohide（自動的に隠す）　使わないときはツールバーを非表示にします。ツールバーが通常表示されている画面の端にマウスを動かすと、再び表示されます。
Autoload（自動起動）　Windows 起動時に、自動的にツールバーを呼び出します。
About（バージョン情報）　著作の詳細を表示します。
Exit（終了）　ツールバーを閉じます。

1.4.2 Typical Display（表示形式）

このアプリケーションは Multiple Document Interface デザイン(MDI)を採用しており、メインウィンドウとメインウィンドウ内のいくつかのビューウィンドウから構成されています。メインウィンドウのメニューはアクティブなビューウィンドウに対して有効で、ビューウィンドウにはメニューはありません。

制御や入力には多くの方法があります。すべてのコマンドはメニューから選択可能です。また、よく使用する機能はツールバーからも選択できます。マウスからの入力が必要な機能はマウス(ツール)パレットから選択します。

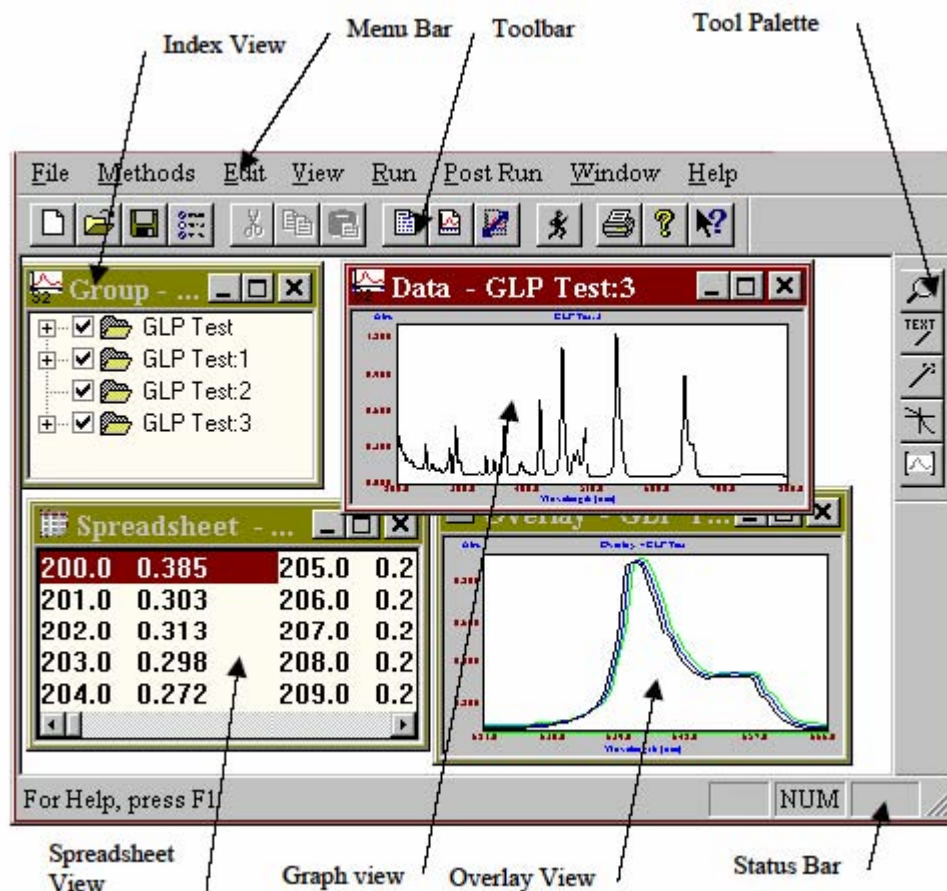



Figure.1ーアプリケーションウィンドウの例

1.4.3 Rigit Mouse Click(マウス右ボタンクリック)

Windows では操作するにあたり Windows 3.1 よりも頻繁にマウスの右ボタンをクリックします。マウスの右ボタンをクリックすると、マウスポインターのあるアイテムに適用可能な機能がポップアップメニューとして現れます。特性メニューを表示するには、メインウィンドウ、ビューウィンドウ、ファイルマネージャー内のファイルの上でマウスの右ボタンをクリックします。選択可能なメニューの内容は、既存のメニュー内に存在するものと同じです。

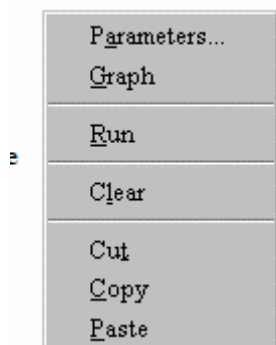



Figure.2 –マウス右クリックメニュー例

1.4.4 Status Bar（ステータスバー）

ステータスバーはアプリケーションが起動している間、情報を表示します。メニューアイテムやツールバーボタンを選択すると、ステータスバーは選択したアイテムの目的を表示します。グラフビュー上にマウスポインターがあるときマウスボタンを押すと、カーソルの位置、情報が表示され、測定中であれば機器の状態が表示されます。メニューバーのビューをクリックしてステータスバーの表示、非表示を選択できます。

Figure.3ーステータスバー

1.4.5 Toolbar and Mouse Palette（ツールバーおよびマウスパレット）

ツールバーには頻繁に使用するメニューコマンドが含まれており、それらのコマンドを迅速に選択することを可能にしています。メニューバーのビューをクリックしてツールバーの表示、非表示を選択できます。ツールバーに通常表示されるコマンドは：File (New, Open, Save, Setup)、Edit (Cut, Copy, Paste)、View (Parameters, Graph, Options)、Run (All Modes)、Print、Help、About です。ツールバーのスペース部分でマウスをクリックすると、使いやすい位置に移動することが可能です。

Figure 4 - Typical Application Toolbar

Figure.4ーアプリケーションツールバーの例

マウスパレットはすべてのマウスによるグラフ操作を含むポップアップツールバーです。Zoom（グラフの拡大）、Add label（テキストの挿入）、Move(カーソル移動) 、Trace（グラ

フのトレース）、Define（領域設定）などのオプションがあります。Define オプションで領域を設定すると、ポップアップメニューが表示されその領域での Autoscaling、Peak 検索などができます。メニューバーのビューをクリックしてパレットの表示、非表示を選択できます。また、パレットのスペース部分でマウスをクリックして、使いやすい位置に移動することが可能です。

Figure.5－マウスパレットの例

1.5 Wavescan、Reaction Kinetics、Time Drive、Culture、Tm （モジュールの概要）
このマニュアルでは、たくさんの異なる種類のファイルが紹介されています。。
Method ファイルには、測定に必要な基本パラメータがあらかじめ設定されています。
Data ファイルには、測定データが保存されます。
Spreadsheet ファイルは、スプレッドシート（表計算）機能を使って作成されたテキストファイルです。Excel のような表計算パッケージソフトで処理可能なフォーマットで測定データが保存されています。
ファイルはすべて一般的な Windows の操作により開いたり、保存したりしますので、ロングファイルネームや拡張子に対応し、さらにファイルの削除やファイル名の変更などが行えます。

各モジュールは、Microsoft Excel のワークグループ機能と同じようなグループ概念に基づいて設計されています。つまり、実際の測定結果である基本データファイルと、それからいろいろな操作などにより作成したビュー（3.5 章参照）はすべて互いにリンクしていて、ひとつのファイルグループを形成しています。この内容については Index ビューで確認できます。同様に、データ項目についても、必要に応じてグループ化し、ひとつのまとまりとして操作することが可能です。例えば、6 つの試料の分析を平行して実行する場合、6 つの独立した分析と 6 つのデータファイルではなく、1 グループの分析

と1個のデータファイルが生成されます。

ひとつの実験が終了すると、Method(パラメータ)ファイルと Data(結果)ファイルの集合がひとつのデータグループとして保存され、Index ビューに表示されます。こうして、ファイルが互いにリンクされます。Method ファイルの名前は、Parameters の Save 機能で定義します。また、Data ファイルの名前は、パラメータ設定で定義した名前(Wavelength Scanning の場合は、scan がデフォルト)に日付と時間を付加したものになります。もちろん、他の名前に変更することも可能です。

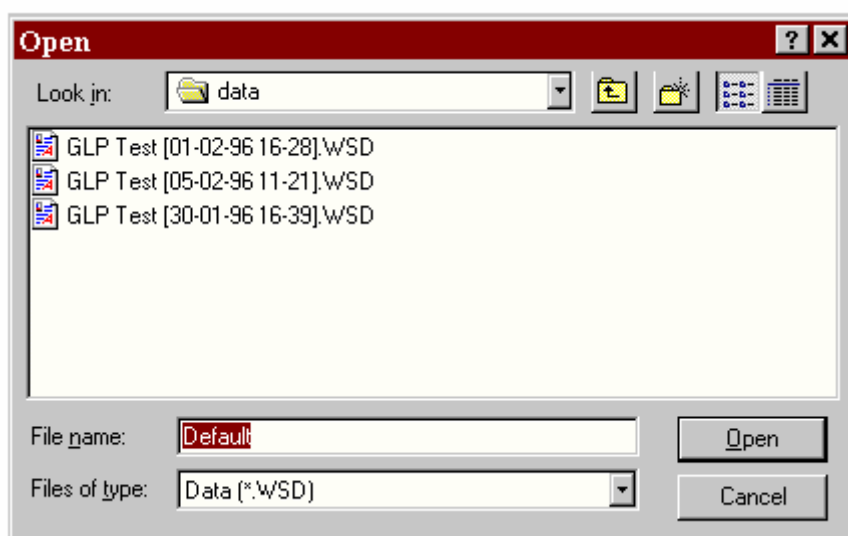



Figure. 6 -Windows のファイルダイアログの例

ファイルの保存や呼び出しはデフォルトのパス名で行われます。これは、セットアップオプションで定義することができ、Data ファイル、Method ファイル、監査ログファイル、Spreadsheet ファイルのそれぞれについてデフォルトのパスを設定できます。

1.5.1 Setting up Parameters(パラメータの設定)

Method は、一組のパラメータ、いくつかのデータ、そしていくつかの結果によって構成されています。パラメータには、データの生成や結果の計算に使用された情報が含まれています。測定 Method には、パラメータを一組だけ含むようになっていて、実行後はこれらのパラメータは読み出し専用になり、修正することはできなくなります。パラメータオプションで内容確認は可能です。ひとつまたは複数の測定メソッドは、ひとつのデータグループとして保存、操作することができます。

メソッド（Method）とは、一組または複数組のパラメータの集まりです。これらのパラメータは、一組の共通パラメータに、測定のために必要な固有のパラメータを追加したものです。Parameters オプションで、これらのパラメータを編集することができます。

Parameters オプションは、タブ付ダイアログボックスで表示され、Parameters（パラメータ）、Details（詳細）、Display（表示）、Run Options（実行オプション）の 4 つのページに分かれています。Parameters タブには各測定に固有の設定内容が含まれ、Details タブではこれ以外の測定に関しての情報（例えば測定名、濃度など）を設定します。Display タブでは、データをどのように表示するかを設定します。また、Run Option タブでは、測定後にデータ操作や印刷を自動的に行うかどうかや、データの表示について設定できます。

パラメータには、測定時（ランタイム）にしか定義できないものもあります。これらのパラメータは、メソッドの中にデフォルト値として定義しておき、与えられたパラメータに機器が対応していない場合は、測定時に修正することができます。これらの値はまた、データのパラメータの中に保存しておいて参照することもできます。

1.5.2 Running an Experiment（測定）

パラメータを保存する場合、デフォルトでは、メソッドとして保存されます。ロックがかかっていなければ、パラメータは編集可能です。メソッドは必要に応じて保存したり、編集したりできます。

メソッドを実行すると、ランタイムパラメータがダイアログボックス中に表示されます。他にも分析する試料がある場合は、追加することができます。実際に分析する試料よりも多くの試料が定義されている場合は、この中から必要な試料だけを選択します。加えられた変更は保存することができ、再保存されたメソッドは、新しく追加した試料の情報も含めて、後日使用することができます。メソッドが実行されると、メソッド中に定義された各試料には、それぞれのパラメータのコピーとともに、それぞれ固有のデータ構造が与えられ、このデータが実験の全過程を通して入力され処理されます。この後、メソッドはデータグループとして再表示されます。

Index からランを選択すると、データグループから新しいメソッドへパラメータがコピーされ、この新しいメソッドから測定が開始されます。メソッドもデータも選択していない状態でランを選ぶと、新しい（デフォルトの）メソッドが作成されます。このメソッドは、Run ダイアログボックスの Modify オプションを使って定義できます。

クイックランオプションを利用して測定を簡略化することもできます。メソッドが読み込まれていない状態で Run → Method を選択すると、一過程でメソッドを読み込んで実行することができます。Run → Default を選ぶとさらに素早く実行できます。この場合は、standard（標準）と呼ばれるメソッドが読み込まれるか、または新しいメソッドが作成されて、自動的に実行されます。

1.6 Quantification、Multi Wavelength、Fraction Analysis（モジュールの概要）
これらのアプリケーションでは、（1.5）で述べてきたようなグループの概念ではなく、もっと標準的な Method - Data アプローチを使っています。データは以下のような別々の部分に分かれ、一部またはすべてのアプリケーションに適用されます。

Parameters（パラメータ）
3 つのアプリケーションすべてに適用。実行ごとの固有の情報を含む。
Standard Concentrations（標準濃度）
Quantification にのみ適用。標準濃度の値を含む。
Standards Data（標準データ）
Quantification にのみ適用。アプリケーションによって収集された標準データを含む。
Sample List（試料リスト）
3 つのアプリケーションすべてに適用。個々の試料に関する情報を含む。
Sample Data（試料データ）
3 つのアプリケーションすべてに適用。 各試料に対して収集されたデータ。
Results（結果）
3 つのアプリケーションすべてに適用。試料の情報およびデータと関連。
Spreadsheet（スプレッドシート）

3 つのアプリケーションすべてに適用。表計算ソフトウエアでの利用に適したフォーマットにデータを変換。

これらのデータは、Method、Standard、Sample という 3 種類の保存形式で収集されます。それぞれのファイルの拡張子は、M、S、D となっています。

1.6.1 Running an Experiment（実行）
メソッドを作成するには New オプションを選びます。これにはデフォルトのパラメータセットが含まれていて、標準や試料は定義されていません。このメソッドは編集可能で、Parameter オプションを使うと標準濃度を定義できます。同様に、任意のメソッドを読み込んで編集することができます。メソッドを読み込むと、試料リストがビューの中に表示されます。測定する試料を定義するには、このリストを編集します。

各アプリケーションにより、測定方法が異なります。

Quantification
まず標準曲線を作成するために標準サンプルを測定します。これは保存して、以後テンプレートとして利用できます。

標準サンプル測定後、各試料の測定を行います。まず初めに、試料の番号と ID が定義され、その後、これらを実行すると、データが追加されるか、もしくは既存の試料データが置き換えられます。

Multi Wavelength と Fraction Analysis
サンプルデータは、直接メソッドを実行して収集します。
実行中、ランタイムパラメータがダイアログボックスに表示されます。これらは必要に応じて修正可能です。サンプルの追加測定を行うと、自動的にデータが追加されます。実際に測定が必要なサンプルよりも多い数のサンプルが定義されている場合は、定義されているサンプルのリストから必要なサンプルを選択します。メソッドを実行すると、パラメータのコピーとともに、新しいデータ構造が作成されます。メソッド中に定義されている各試料が、このデータ構造に追加され、これらデータが実験の全過程を通じて

収集され、処理されます。
メソッドもデータも選択していない状態でランを選ぶと、新しいメソッドが作成されます。これはランダイアログボックスの Modify オプションで定義することができます。
すべてのアプリケーションにおいて、クイックランオプションを利用して操作を簡略化できます。メソッドが読み込まれていない状態で Run → Method を選択すると、一過程でメソッドを読み込んで測定できます。
Run → Default を選ぶとさらに素早く測定できます。この場合は、standard（標準）と呼ばれるメソッドが読み込まれるか、または新しいメソッドが作成され、測定可能になります。

1.7 Security Facilities（セキュリティ機能）

1.7.1 Parameters Lock （パラメータのロック）

メソッドの内容を変更できないようにパラメータをロックすることができます。入力可能な文字に制限はありません。それぞれのメソッドに異なるパスワードを割り当てることができます。ただし、これらのロックは編集のみを対象とすることに注意してください。また、メソッドのロックは、このメソッドによって生成されるデータファイルに対するセキュリティを保証するものではなく、これらのデータファイルは開いたり参照したりすることが可能です。SWIFT II ソフトウエアへのアクセスを禁止するには、専用のソフトウエアパッケージを使用してコンピューター自体にパスワードロックをかける必要があります。

1.7.2 Audit Trail（監査トレイル）

Audit Trail（監査トレイル）は、使用者が行う操作、これに続く結果の編集やデータ処理などを、読み出し専用 / 書き込み禁止のテキストファイルの形式で記録しておき、管理者が後でチェックできるようにします。監査トレイルは、特別なファイルに作成・保存され、*.LOG という拡張子によって見分けることができます。

監査トレイルの機能は、セットアップで設定し、管理者によって定義されたパスワードでロックすることができます。入力可能な文字に制限はありません。この機能はアプリケーション全般に働きます。つまり、あるアプリケーションでこの機能を有効にすると、全アプリケーションで有効になります。

監査トレイルファイル（*.LOG）にアクセスするには、Windows の「ノートパッド」または

「ワードパッド」を使用します。「ワードパッド」の場合はスタート＞プログラム＞アクセサリー＞ワードパッドで起動し、ファイル＞［開くを選択してダイアログを開き、「ファイルの場所」で適当なフォルダ（デフォルトの場所は C:¥Program Files¥SWIFT II の中の各アプリケーションフォルダ）を選んだ後、「ファイル名」の欄に *.log と入力して改行キーを打ち、目的の *.LOG ファイルをダブルクリックして開きます。ファイルの表示については制限がありません。つまり、Parameters の Lock / Unlock 機能と、Audit Trail の Lock / Unlock 機能には制約されません。ただし、監査トレイルファイルは読み出し専用で書き込み禁止になっていますので、オリジナルのファイルは上書きしたり変更したりできません。

監査トレイルファイルを調べれば、データがオリジナルかどうかわかります。またファイル名の変更も記録され、以後データに加えられたすべての操作は、新しい*.LOG ファイルに記録されます。

2. 機器の管理

2.1 はじめに

Instrument Control Panel（機器コントロールパネル）は、他のアプリケーションから独立した、基礎的な動作モードを表示します。Instrument Control Panel を起動すると、必要なコントロールデータ（例えば、機器の種類など）を読み込みます。

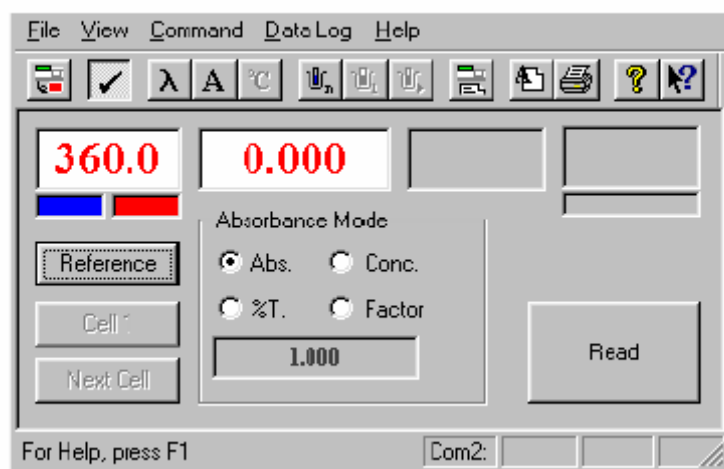



Figure.7－Instrument Control Panel

Instrument Control Panel には、セットアップ（2.2）と機器管理(2.3)の 2 つの機能があります。

2.1.1 Programme Appearance（プログラム構成）

Instrument Control Panel は Title bar、Instrument Toolbar、Status bar、Application bar そして Dialogue Box 機能を持つダイアログボックス型アプリケーションです。

Title bar はアプリケーションタイトルを表示します。

Figure.8－Instrument Control タイトルバー

Instrument Toolbar にはよく使用する機能のショートカットボタンがあります。

Figure. 9 -Instrument Control Toolbar　ツールバー

Instrument Control Toolbar には順に次のボタンがあります。

Set-up　Connect/Disconnect　Set Wavelength　Absorbance Mode

Set Peltier Temperature　Set Accessory　Cell position 1　Next cell

Configure　Log Reading　Print　About　Help

Status bar にはテキスト区画と 4 つのインディケータ区画があります。

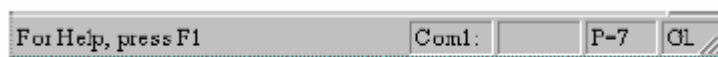



Figure. 10 -Instrument Control Status Bar　ステータスバー

テキスト区画にはヘルプメッセージや選択したコントロール／メニューの動作内容が表示されます。4 つの小さな区画は標準接続ポート、増設接続ポート、data logging printer status、GLP printer status を表示します。

メニューはすべての使用可能コマンドを含んでおり、File、View、Command、Data Log、Help にグループ分けされています。ここでは Instrument Control の Set-up と Command オプションについて説明します。その他のオプションについては、Section 3.3「Command Menu の説明」をご参照ください。

分光光度計が接続されていない場合、Command オプションは Connect 以外反転表示になっておらず、実行できません。

Figure.11－Instrument Control メニュー構成

ダイアログボックスの内容は Instrument Control を示しています。

Figure. 12 -Instrument Control Panel　コントロールパネル

このパネルは分光光度計の状態を示しています。それぞれのボックスは波長（その下はランプ状態）、測定値、サンプル位置、シッパーの状態（その下はペルチェアクセサリー温度表）を表示しています。

Wavelength	**Reading**	**Sample Position / Sipper Status**	**Temperature** (if Peltier accessory fitted)
(Indicators below refer to lamp status)			(indicator below refers to heating / cooling status)

これらは他の SWIFT II アプリケーションによって記録された値を表示していても、機器と接続していなければグレーで表示されます。

分光光度計の状態は適当なステータスウィンドウかプッシュボタンを選択して切り替えることができます。すべてのデータとコマンドはスタンダードダイアログコントロールを利用して入力します。

Absorbance Mode 吸光度モードボックスでは以下の機能が利用できます。

1）Abs.：吸光度を測定する
2) ％T：透過率を測定する
3）Conc. ：既知サンプルの濃度を入力し、未知サンプルの値と比較する
4）Factor：吸光度値にファクターを掛ける
ファクターや濃度を入力する時は Conc./Factor いずれかを選択した後、数字ディスプレイボックスをクリックします。

2.1.2 Dynamic Data Exchange（ダイナミックデータ交換）
Instrument Control Panel には、プログラムの中心に Dynamic Data Exchange（ DDE ）があります。これは Excel、Word ような他のパッケージが機器にコマンドを送り、そこからデータの収集を可能にします。これらには Help Files に記載された DDE 言語が含まれています。

2.1.3 Specification（仕様）
Instrument Control Panel の仕様は、接続している分光光度計の仕様を反映します。
Wavelength range 190.0ー1100.0nm、190.0ー900.0nm など
Temperature range 20℃から、取り付けられたアクセサリーにより 50℃、80℃、105℃など
Absorbance range 機器に依存しており、ソフトウエアによって制限されることはありません。吸光度を小数点以下 3 ケタで示し、%T は小数点以下1ケタ、濃度とファクターは移動小数点形式で常に表示します。
2.2 Set up（セットアップ）
分光光度計を使用する前に、システムはアプリケーションとハードウエアに含まれる他のコンポーネントの位置、状況、機能についてのいくつかの情報を必要とします。これらはセットアップダイアログボックスを経由して行います。

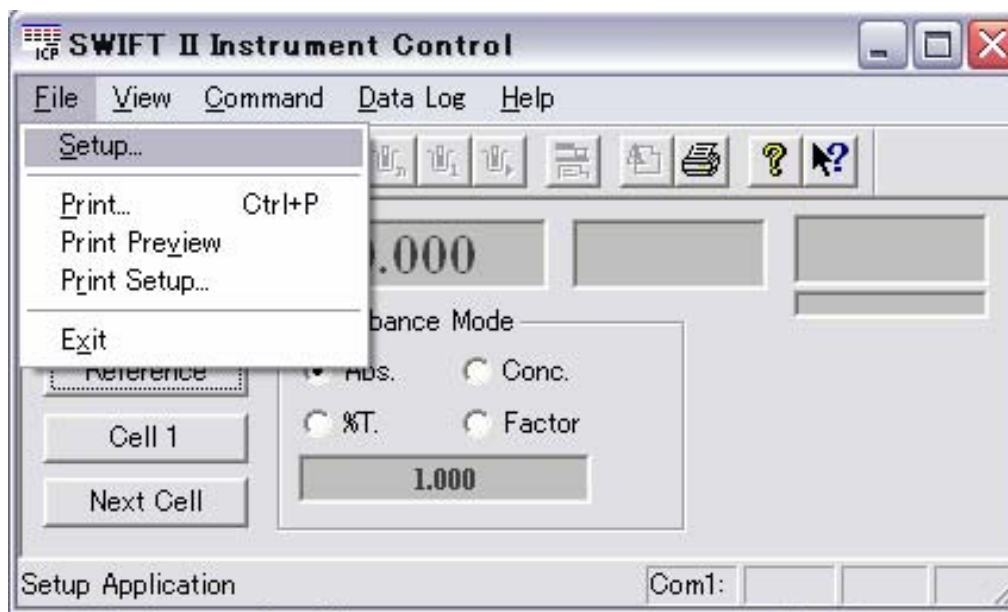



Figure.13－Setup 画面の選択

File->Setup menu を選択すると以下の tab page が存在します。

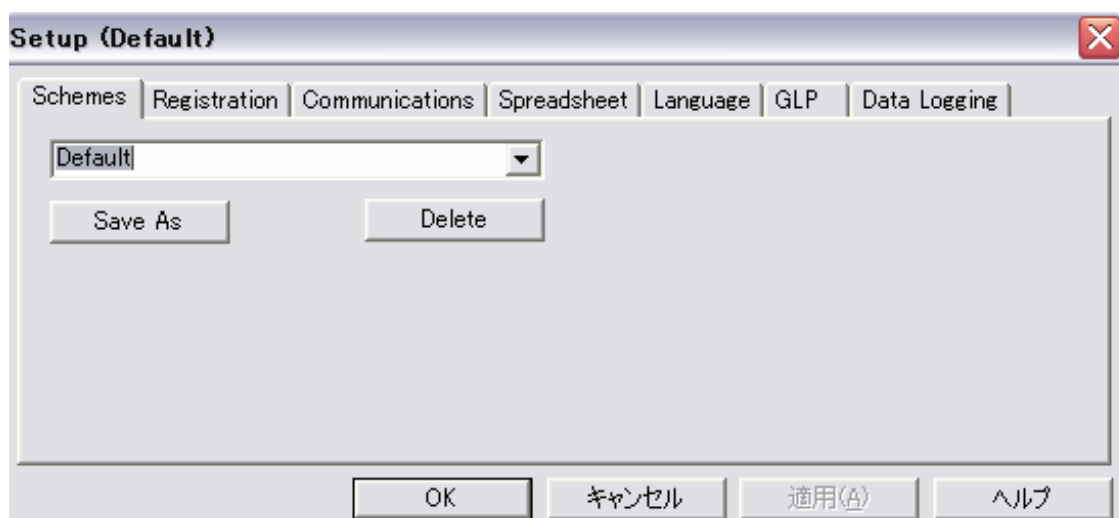



Figure.14－Schimes 画面

このページは、セットアップで登録した内容を名前をつけて保存し、必要な測定系で呼び出して使えるようにします。複数の使用者がいる場合に、各使用者固有の設定がある場合に有用です。

Setup (Default)

Schemes | Registration | Communications | Spreadsheet | Language | GLP | Data Logging

Name

Address

Instrument Serial Number

88345

OK　キャンセル　適用(A)　ヘルプ

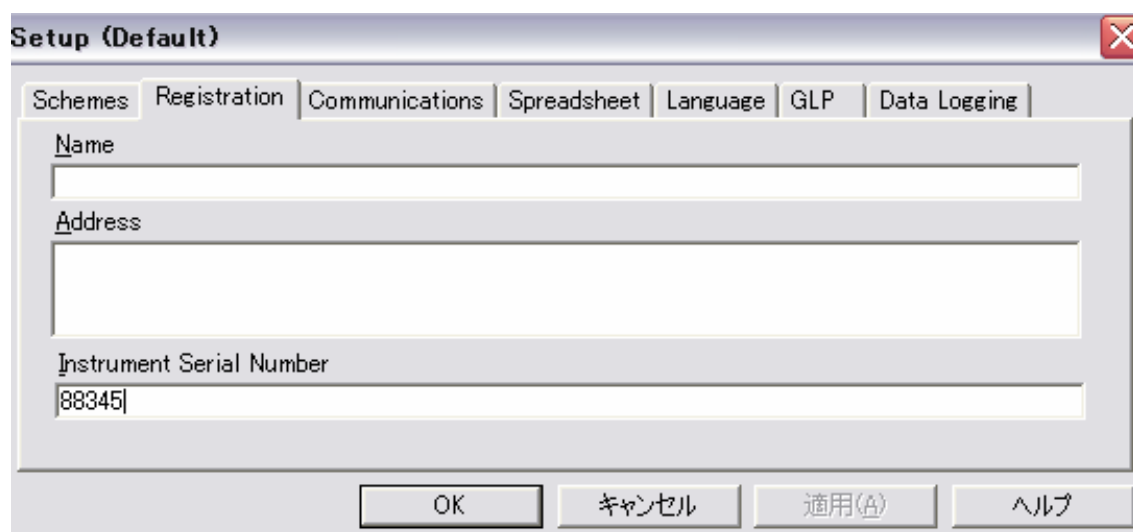



Figure.15－Registration 画面

このページでは各種レポート、GLP ステートメントで作成されるファイルに、ユーザーについての情報を追加することができます。パラメータにはユーザー名、所在地、分光光度計のシリアル番号があります。接続している分光光度計のシリアル番号は必須項目で、正確なシリアル番号を入力しなければアプリケーションは作動しません。

Figure.16－Communications 画面

このページは分光光度計のシルアルポートのロケーションと関連したハードウエアのセットアップに使用します。パラメータは 分光光度計のタイプ、接続しているコムポート番号、外部ペルティエ装置を接続しているか、している場合には使用しているコムポート番号はどれかを設定します。また、Check for External Peltier にチェックを入れると接続が正しいか確認が行われます。分光光度計のタイプは Instrumentation をクリックす

ると機種名が表示されますので、接続している機種名を選択し、OK を押します。

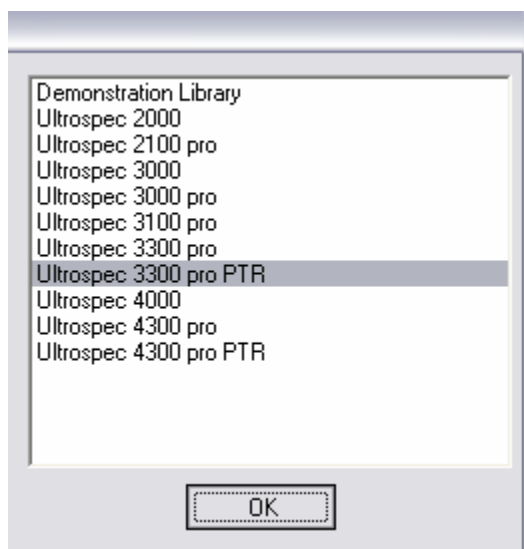



Figure.17－接続機器選択画面

Figure.18－Spreadsheet 画面

ここではデフォルトで、Direct to Excel にチェックが入っています。PC に Microsoft Excel がインストールされていれば、測定データを直接 Excel 形式のファイルに保存できます。もうひとつの選択は To text file で、このオプションにチェックを入れると、Spacing Type 選択画面が現れ、出力するスプレッドシートのフォーマットの変更が可能になり、異なったスプレッドシートが作成できます。オプションはコロン、コンマ、スペースまたはタブ（タブがデフォルトで、Microsoft Excel 形式になります）およびユーザー定

義のなかから選択します。

Setup (Default)

Schemes | Registration | Communications | Spreadsheet | Language | GLP | Data Logging

Direct to Excel

To text file

Reset

Spacing Type

Colon　Comma

Space　Tab

Other

OK　キャンセル　適用(A)　ヘルプ

Figure.19－Text file 設定画面

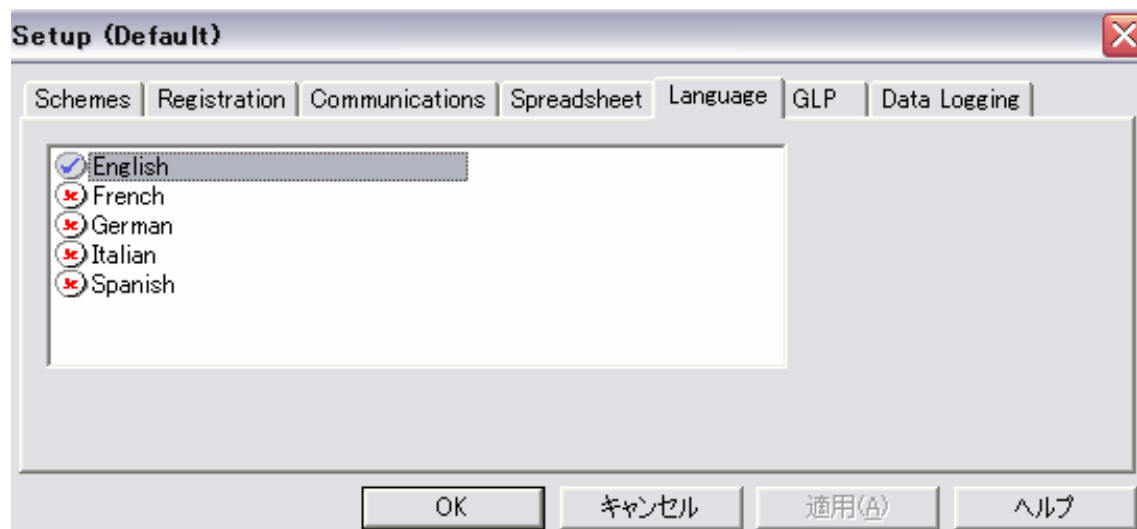



Figure.20－Language 選択画面

このダイアログボックスは選択可能な言語のリストを表示します。

言語には英語、フランス語、ドイツ語、イタリア語、スペイン語の項目がありますが、現段階では英語のみ使用可能になっています。

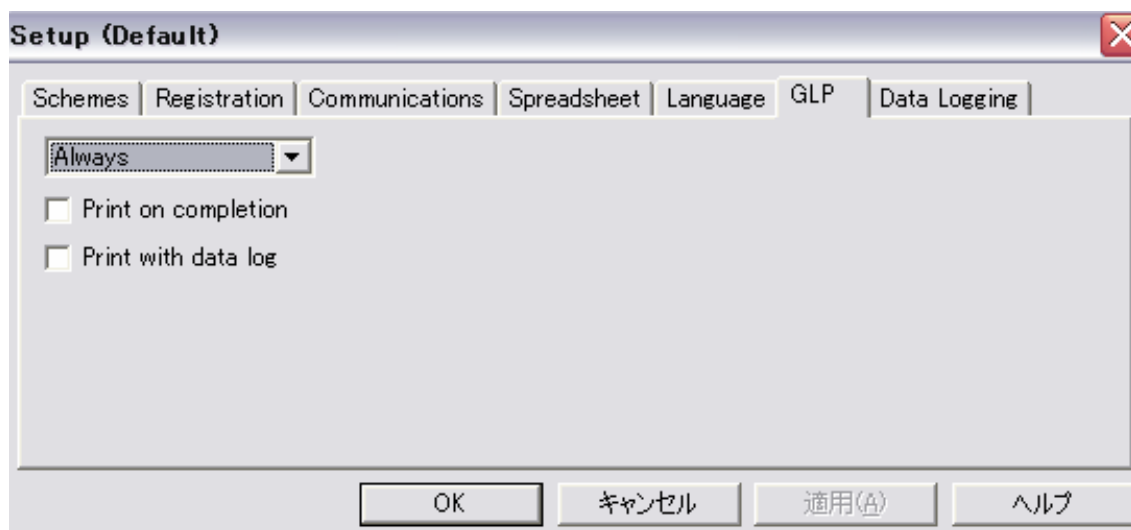



Figure.21－GLP 設定画面

このページでは GLP レポートのレベルを設定することができます。Never,Always,Daily および Weekly から選択します。その結果は保存され、Audit Trail に追加したり、プリントアウトしたりすることができます。Always は機器と接続されるたびに GLP status をモニターします。

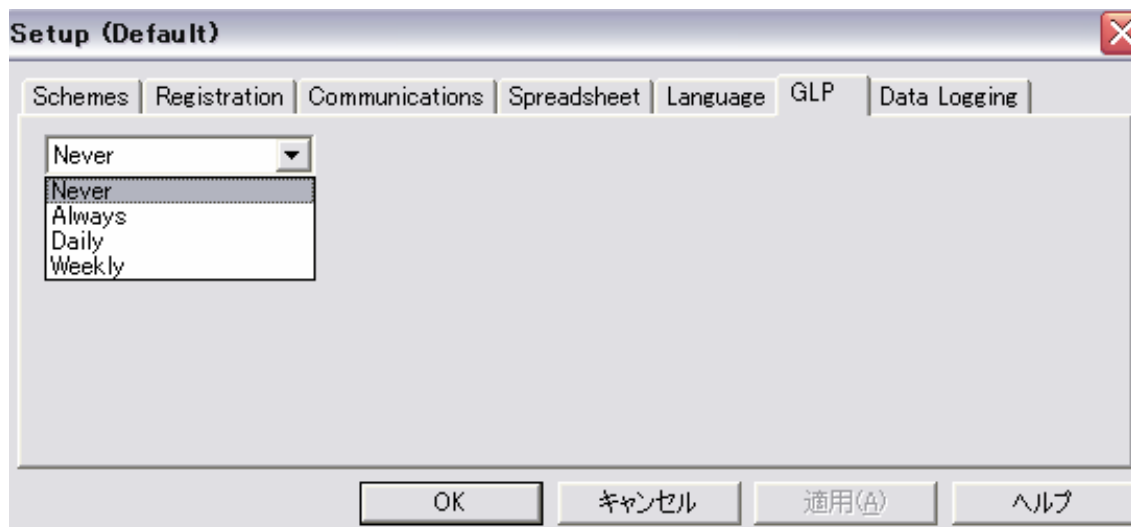



Figure.22－GLP 設定画面の選択例

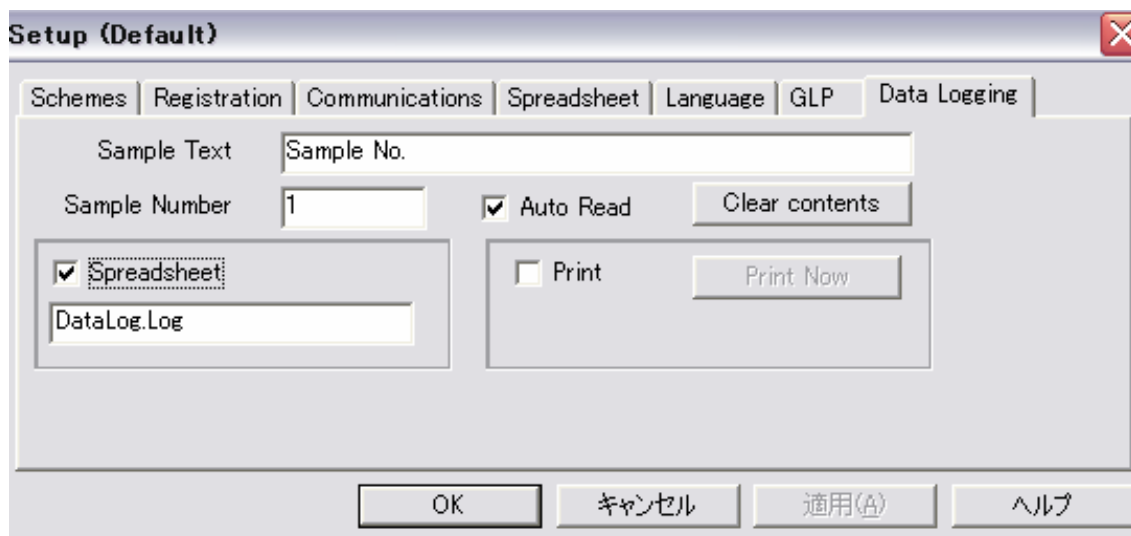



Figure.23－Data logging 設定画面

このページはデータログの収集内容の処理方法をセットアップするために使用します。データはプリンター、スプレッドシートファイルのいずれにも出力・保存できます。データは既存のファイルに追加されます。Auto Read にチェックが入っていれば自動的に、または、Log Reading（メニューバーまたはアイコン）を選択して手動でログとして保存できます。通常は Auto Read にチェックを入れておくことをお奨めします。

2.2.1 Setting up the instrument after software installation（ソフトウエアインストール後のセットアップ）

はじめて分光光度計を作動させる場合、ダイアログボックス上で以下の設定をします。

・ユーザー情報を入力・登録する

ご使用機関名（必須ではありませんが、プリント時にヘッダーとして印刷される情報です。デフォルトでは製造元の Biochrom Ltd です）、所在地、分光光度計シリアル番号（必須です）。→2.2、Registration 参照

・分光光度計タイプを選定する（必須です）。→2.2、Communication 参照

ソフトウエアの登録が完了した後、機器のセットアップをします。

・コムポートに分光光度計をつなぎ、必要に応じて、他の コムポートに外部ペルティエ装置をつなぎます。

・コムポートの選択をします（必須です）。→2.2、Communication 参照

・Set-up ダイアログボックスを閉じ、 control Panel の Command をクリックし Connect オプションを選択します。

Figure.24－Command＞Connect 選択画面

これでいままでの入力、登録、設定に間違いがなければ分光光度計と PC が接続され、Instrument Control がアクティブになります。

2.2.2 Setting up an accessory（アクセサリーのセットアップ）

アクセサリーは分光光度計を接続すると自動的に認識されます。アクセサリーを変更したときはから Command をクリックし、Check Accessory ボタンを押して再認識させることが必要です。

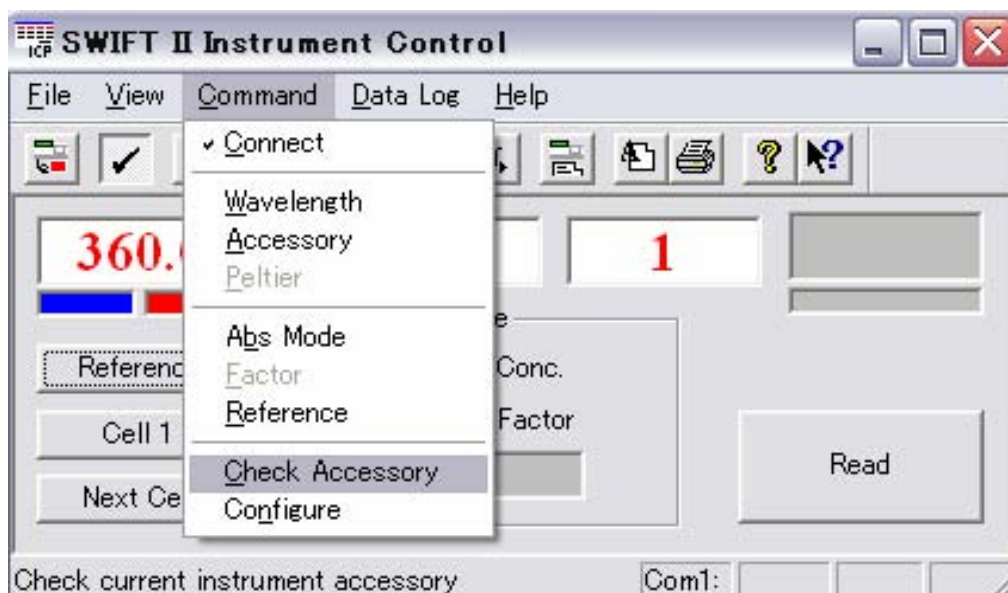



Figure.25－アクセサリー認識操作

装着しているアクセサリーを認識して、表示します。確認後 OK を押して次の操作を行ってください。

同じ操作は Command の中の Configure をクリックし、下記画面の中の Check Accessory をクリックすることでも可能です。

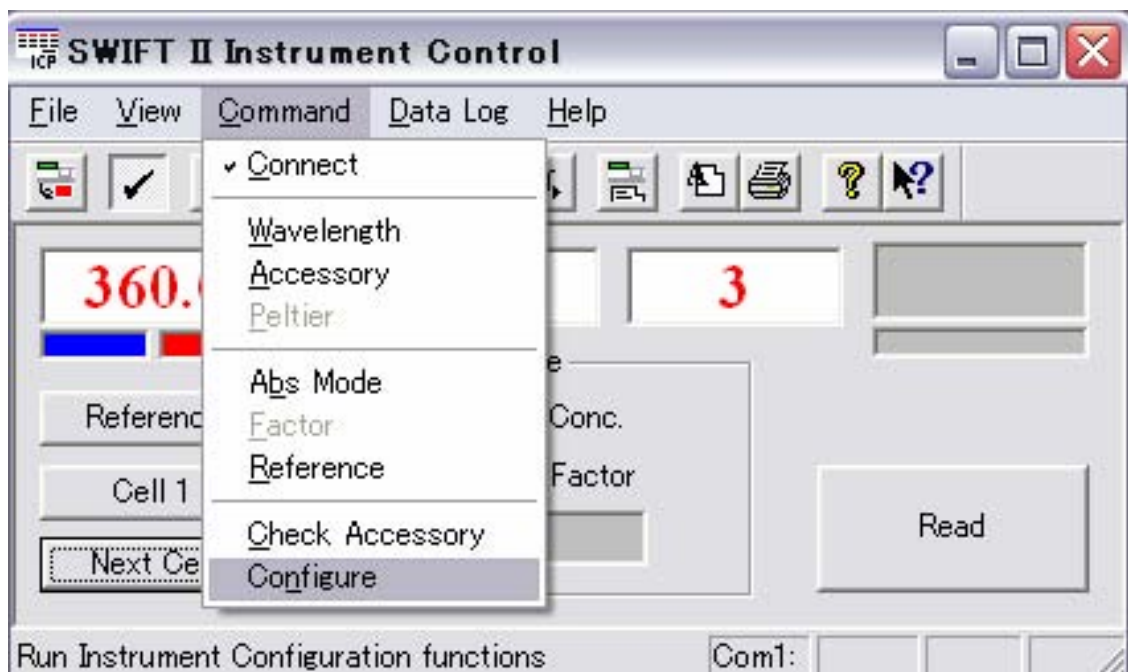



Figure.26－Configure 選択画面

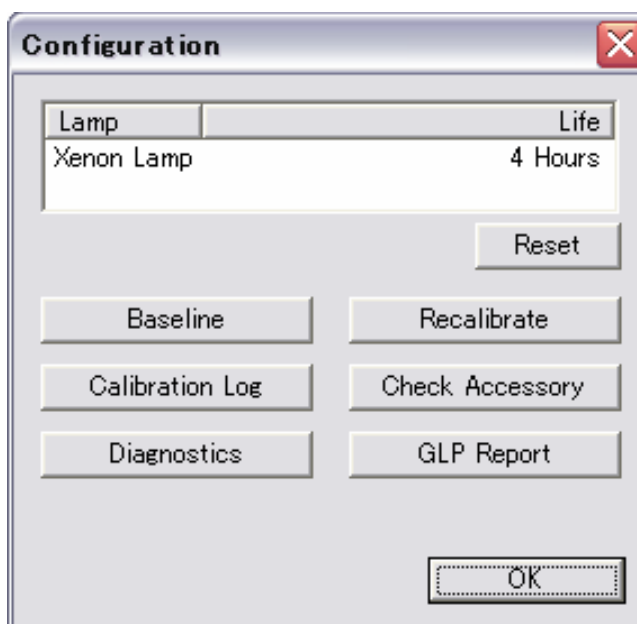



Figure.27－Configure 画面

2.2.3 Using the Sipper（シッパーの使用）

シッパーのインストールにはシッパーに付属のアクセサリーユーザーマニュアルをご覧ください。2.2.2 Setting up an accessory にしたがって、シッパーを認識させます。

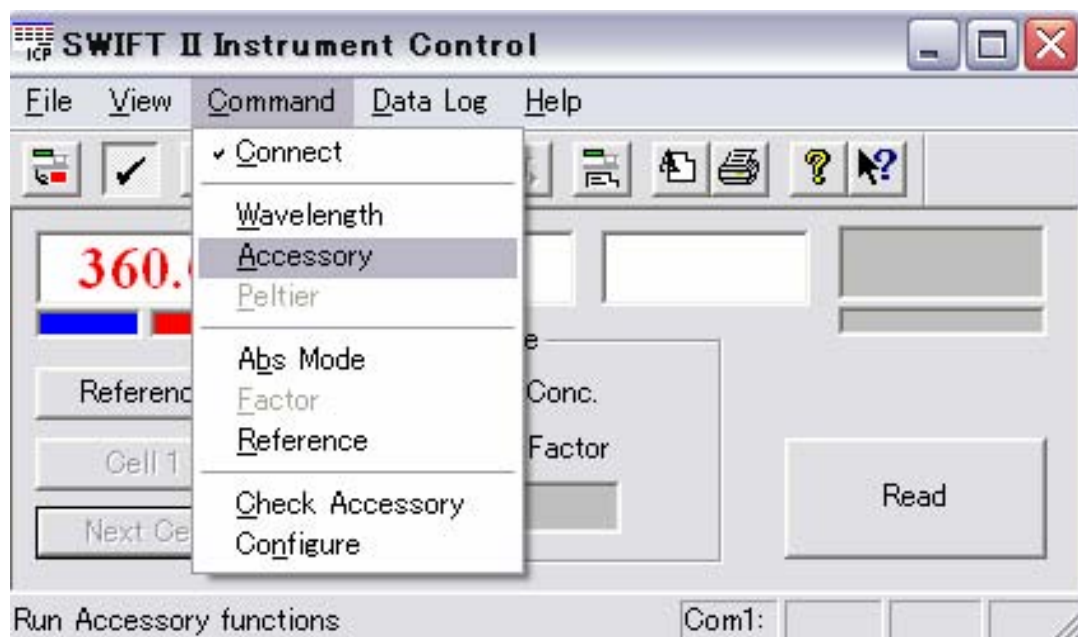



Figure.28－シッパーの選択（アクセサリーの確認）

Figure.29－シッパー確認画面

OK を押して、次の操作に移ります。

Command をクリックし、Accessory ボタンを選択します。シッパーのセットアップ画面、Pump Parameters ダイアログボックスが表示され、パラメータを選択できます。

Pump Parameters

Sip volume 0.5

Pull volume 0.5

Settle time 1.0

Mode

Waste

Return

Calibrate Wash OK

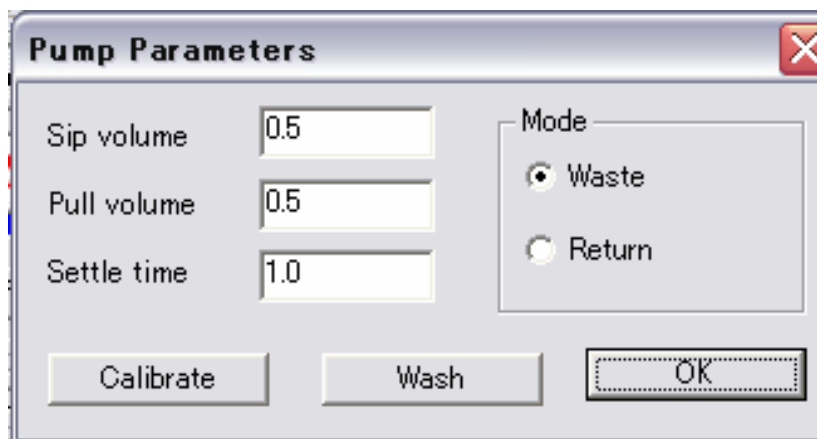



Figure.30ーシッパーパラメータ入力画面

シッパーパラメータには次のものがあります。

Mode: 測定した溶液の処理を示します。Waste では排液管へ送液されます。Return では吸引した管へ送液します。

Sip Volume: 吸引される量を示しています(0.1ー60ml)

Pull Volume: 吸引される液が最適位置に入るまでの長さを示しており、設定した量の空気が液の後に引き込まれます(0.0ー60ml)。

Settle Time: 読み取りが行われる迄の時間の長さを示し(0.0ー10.0 秒)、ペルチェセルフォルダを使用している時に便利です。

Calibrate: シリンダーから液を吸引し(10ー120 秒間)、吸引された液体のボリュームを入力することによりキャリブレーション係数が算出されます。

Wash: 停止されるまでシッパーチューブを洗浄します。

測定操作中は以下のひとつを表示します。

Blank Display サンプルがロードされていません。

"Busy" サンプルがロード中、あるいは戻している最中。

"Ret" サンプルがロードされており、待機中。

シッパー操作手順はすべてのアプリケーションにおいて共通です。

1)シッパー正面のボタンは押された状態になっています。

2）設定した吸引量を、サンプル液に入れたチューブで吸引します。
3）分光光度計が「ビー」という音で知らせた後、試験管中の液からチューブを取り出します。
4）設定した空気量が吸引され、フローセルへ残液を移します。
5）設定した settle time の間シッパーは作動せず、温度平衡を保ちます。
6）吸光度測定します。
7）シッパー正面のボタンを押してサンプルを試験管に戻します。シッパーが Waste モードの場合は不要です。

2.3 Command（コマンド）

分光光度計が接続されると、メインダイアログボックスから制御できるようになり、分光光度計の状態に関するステータス値が、このダイアログボックスに表示されます。

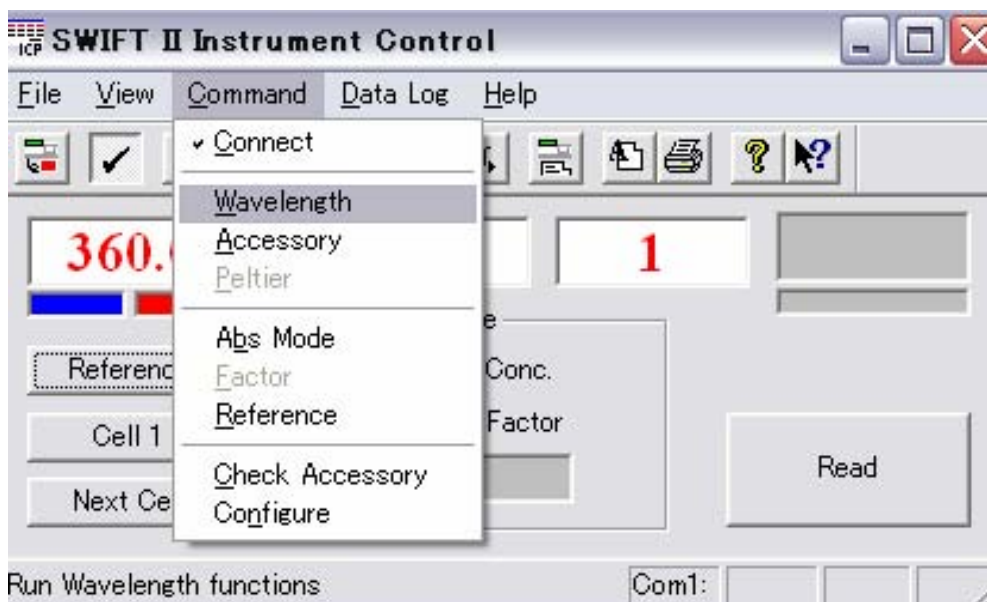



Figure.31－Command 選択画面

全ての作業は、ボタンやステータス上をクリックすることによって実行されます。パラメータは、接続している分光光度計により異なり、また、アクセスのレベルは接続しているアクセサリーによっても制限されます。機能はクリックで直ちに実行されるか、あるいはパラメータの変更を促すダイアログボックスが表示されます。

Command メニューでの使用可能な機能は以下の通りです。

Wavelength

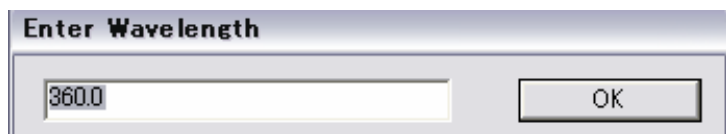



Figure.32－波長入力画面

Wavelength をクリックしてダイアログボックスを開き、波長を入力します。波長の範囲は190.0～1100.0nm です（これは接続している分光光度計により異なります）。

Accessory

Accessory をクリックしてダイアログボックスを開き、サンプルアクセサリーをコントロール可能にします。このページはその時使用しているアクセサリーに依存します。アクセサリーについての詳細は「アクセサリーのセットアップ」のセクションをご覧ください。セルチェンジャーを使用している場合、Sample 1 および Next Sample はツールバーから選択可能です。

Figure.33－セルポジション設定画面

Peltier

Peltier をクリックして温度を設定します。、20～50℃または 20～105℃（Tm 測定用のプログラマブルペルチェアクセサリーを使用している場合）が可能な温度範囲です。

Absorbance Mode

Abs Mode をクリックすると、次の順にモードが変化し、そのときの測定値を表示します。

Absorbance（吸光度）、%Transmission（%透過率）、Concentration（濃度）、Factor（ファクター）。

これらは Reading Status の下に表示されているドットボタンで直接選択することもできます。濃度またはファクターを選択した場合、Command タブの Factor がアクティブになり、クリックするとファクターの入力ができるようになります。

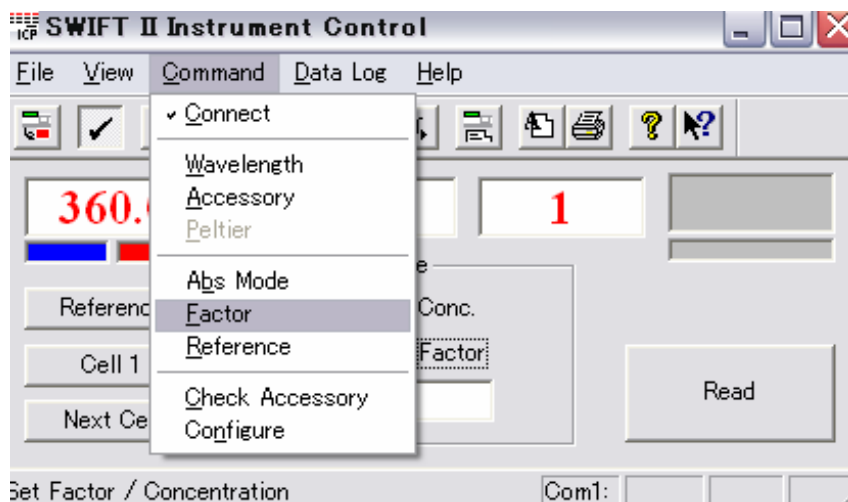



Figure.34－Factor 選択画面

Figure.35－Factor 入力画面

これで吸光度値にファクターを掛けた計算値を表示されます。

Reference

リファレンスを測定します。

Configure

このボタンは、 コンフィギュレーション・ダイアログボックスを開きます。分光光度計により、表示内容が異なります。

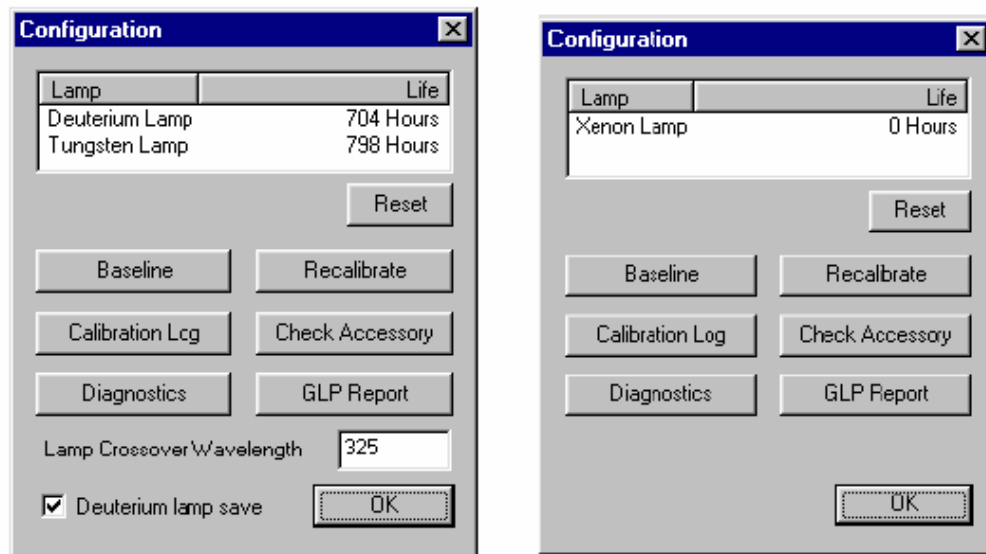



Figure.36－Configuration 画面(左:重水素/タングステンランプ使用機器、右:キセノンランプ使用機器)

Lamp／Life

各ランプの使用時間を表示します。ランプ交換をした後など、Reset をクリックして0に戻せます。

Baseline

新しいベースラインを決め、保存します。

Re-Calibrate

分光光度計の再キャリブレーションをします。

Calibration Log

問題を解決するためにサービスエンジニアに送付する FAX 用に calibration log をプリントアウトできます。

Check Accessory

新しいアクセサリーを認識させます。前頁をご参照ください。

Diagnostics

Diagnostics report をプリントアウトできます。これをそのままサービスエンジニアに FAX で送付することができます。

GLP Report

GLP status を収集し、自動的にプリントアウします。

Lamp Crossover Wavelength（重水素/タングステンランプ使用機器）
分光光度計が UV（重水素）から可視（タングステン）に変換させる波長を設定します。
範囲は 290-380nm で、分光光度計の電源が切れると自動的に 325nm へ戻ります。
Deuteriuim Lamps Save（重水素/タングステンランプ使用機器）
キャブレーション後に重水素ランプを自動的にスイッチオフにします。

3.メニュー説明およびアプリケーションウィンドウ
3.1 はじめに
このセクションではフローチャートにて SWIFT II の使用法を総合的に説明した後（3.2）、各メニュー項目について詳しい説明をしています（3.3）。これらの項目はそれぞれ該当するメニューバーのヘッダー毎にグループ化してありますが、各アプリケーションで共通する部分が多くあります。

Set-up オプション（File>Set-up）については別途説明します（3.4）。

アプリケーション全体に使われるアプリケーションウィンドウ（またはビューウィンドウ）の役割とそれらに関連するメニューについて詳細に記載しています（3.5）。また、アプリケーションごとの相違はそれぞれのアプリケーションで説明します。

Post Run オプションの使用方法については最後に紹介します（3.6）。

3.2 Running in General（測定の実行）
SWIFT II ソフトウエアは連続使用が可能な限り簡単にできるように作成されています。
以下にそのフローチャートを示します。ショートカットは点線で示します。

Simple path for running an experiment

Run Application

Load Method
Select Method menu option
Choose Method from list

Customise Method
Load Data
Select Group Mode
Select Data to be run

Create New Method
Select File→New

Edit Method
Edit Common Parameters
Edit Sample Parameters
Save Method

Post Run Options
Select print options
Select Post Run Options
Save if required

Run Method

Do Run
Select OK
Load Turret
Select OK

Quantification and Multi Wavelength Only
Select Samples
Select sample to toggle On/Off

Figure.37－SWIFT II の基本構成

3.3 Common Menu Descriptions（アプリケーションで使用されるメニュー）

すべてのアプリケーションで同じ表示になるのではないのですが、多くのアプリケーションで共通です。

3.3.1 File（ファイル）

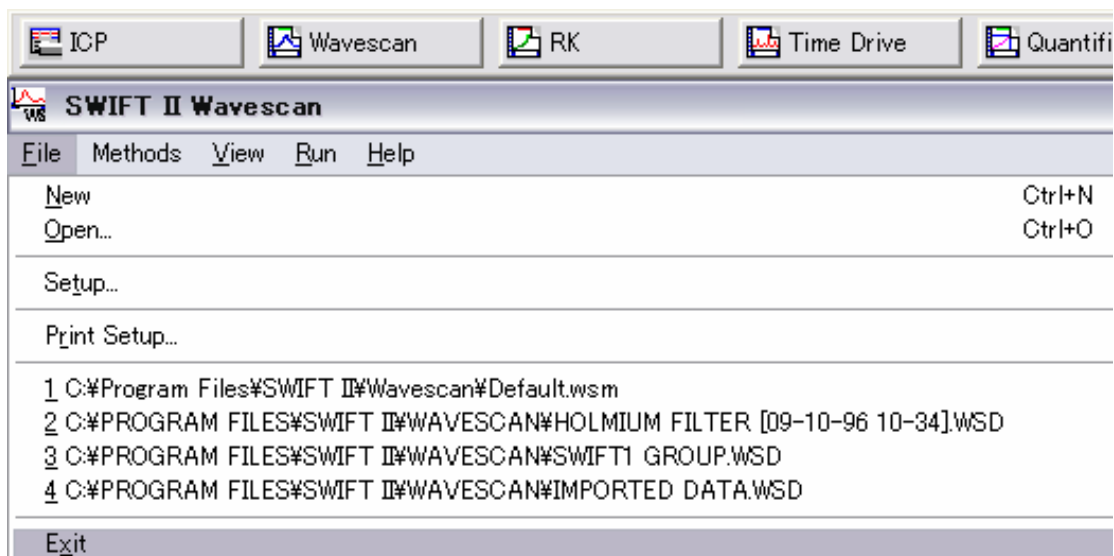



Figure.38－File メニュー例

New

新しい Method を作成します。自動的にデフォルトのパラメータ設定がロードされます。ここでパラメータを必要な内容に変更します。

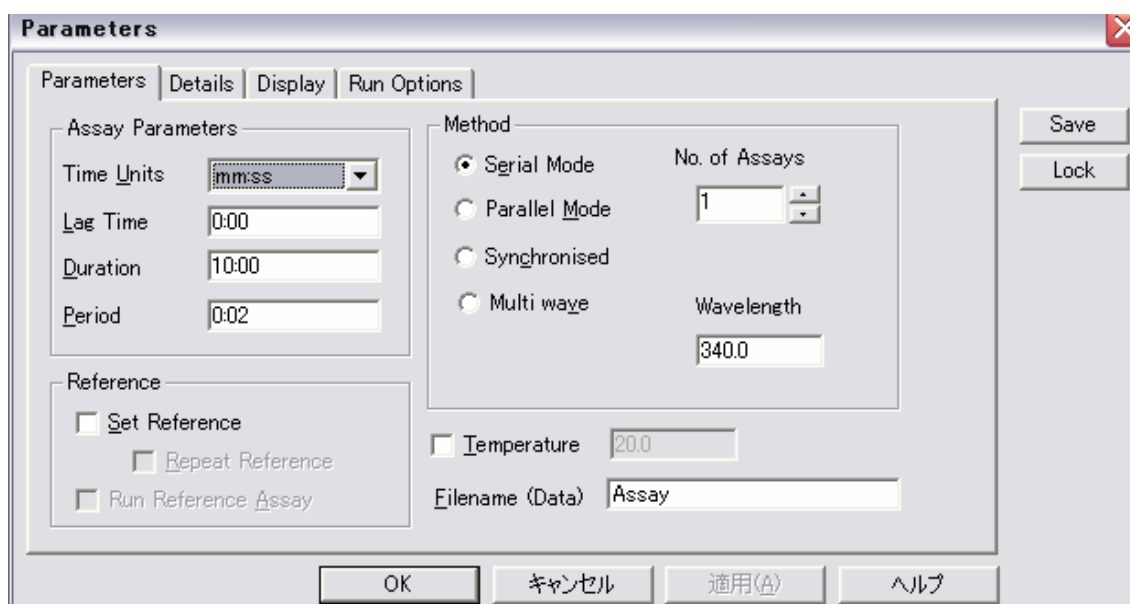



Figure.39－パラメータ設定画面例

ここで設定したパラメータを名前をつけて保存するには右にある Save をクリックします。

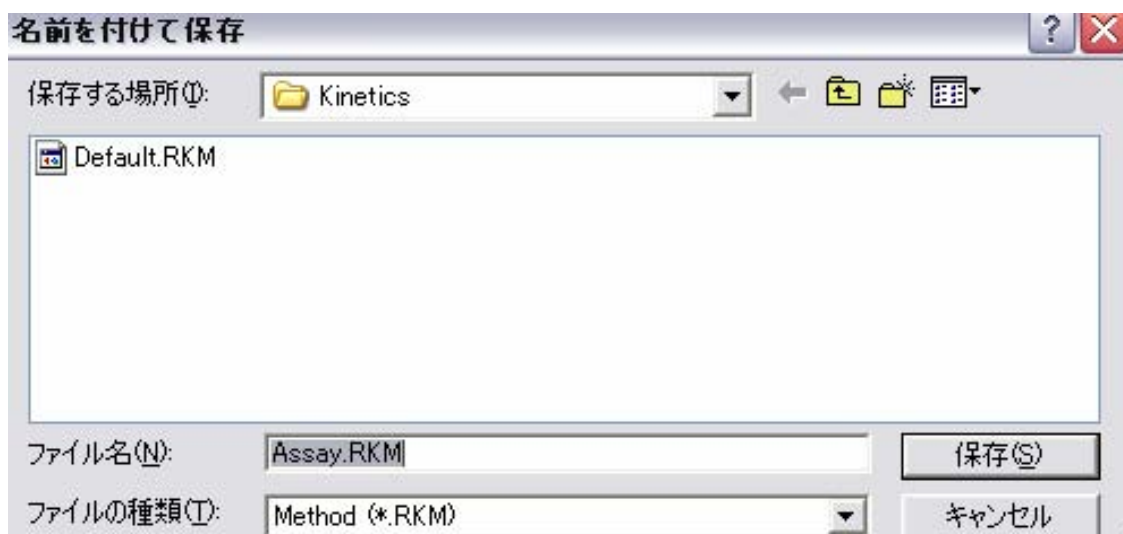



Figure.40－メソッド保存画面

名前をつけて保存の画面になりますので、適当なファイル名をつけて保存をクリックします。

また、右側のLockをクリックするとパスワード入力画面になります。この設定を変更されたくない場合には適当なパスワードを入力してロックします。

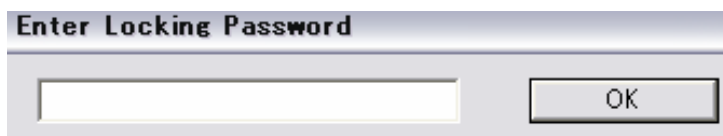



Figure.41－パスワード入力画面

デフォルトメソッドのパラメータを変更しておく方法として、File を開いたときに表示される"Default.**M"ファイルを開いて各パラメータを入力し、上書き保存し、そのデフォルトメソッドを再度使用することもできます。

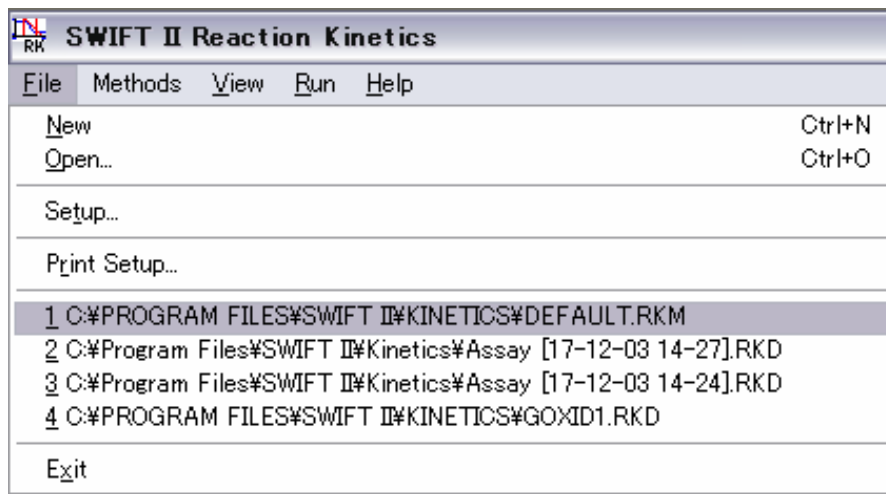



Figure.42－デフォルトメソッドの選択例

"Default.**M"ファイルを開くと左下にファイル表示が出ます。ここで再度 file をクリックすると先ほどより表示されるタブが増えています。

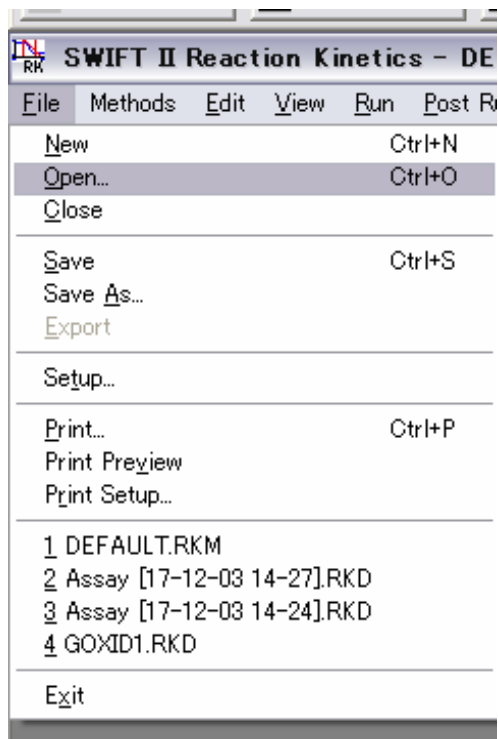



Figure.43－デフォルト選択操作画面例

再度 New をクリックするとパラメータ設定画面が現れますので、必要なパラメータに変更後右側の Save をクリックするか、OK をクリックし、名前をつけて保存の画面でそのまま保存をクリックして上書き保存します。

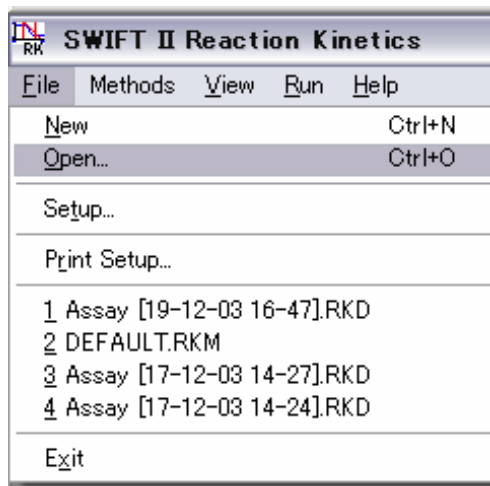
プログラムは、パラメータダイアログボックスを自動的に開きます。このオプションはツールバーから利用できます。

Open

Figure.44－OPEN

選択したディレクトリ中のファイルを開きます。アプリケーションによって異なるデータタイプがロードされます。

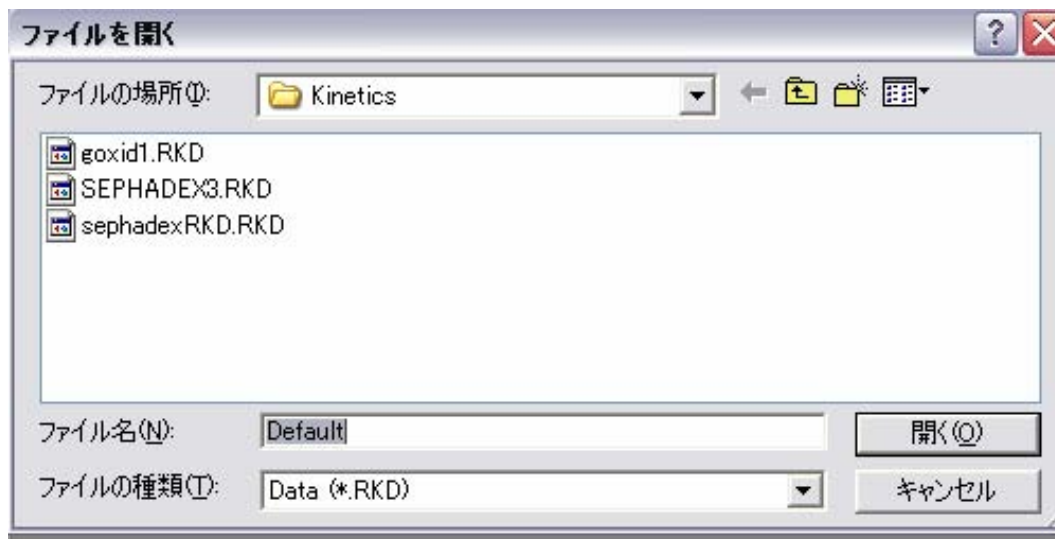



Figure.45－保存されているファイルの選択例

この画面で、ファイルの種類をクリックすると、保存されているさまざまなファイルにアクセスできます。

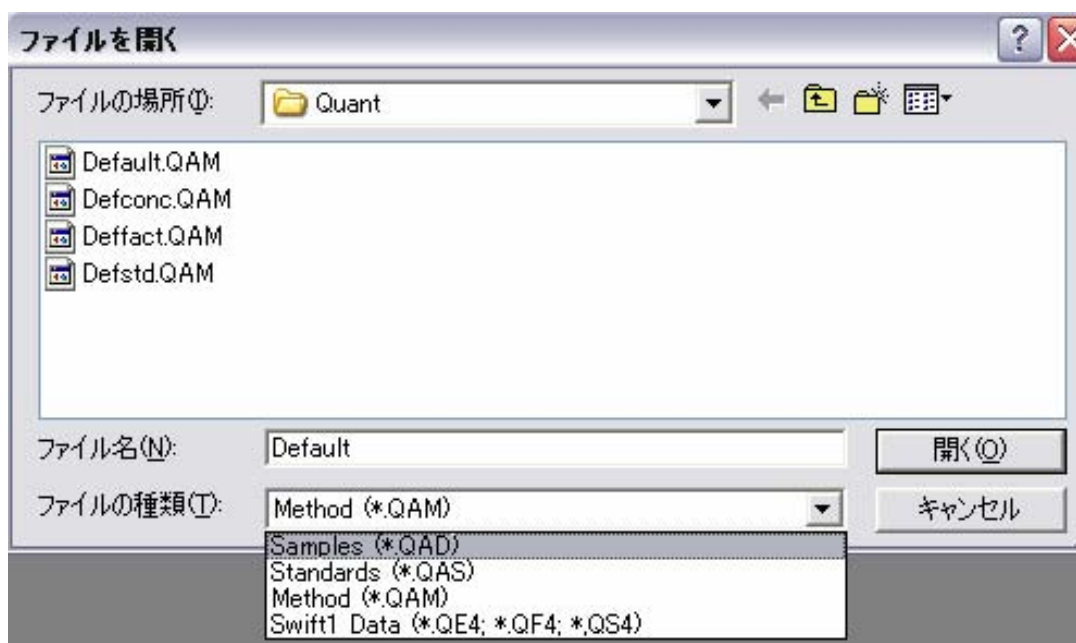



Figure.46ーファイルタイプの選択例

Method

Method ファイルを開きます。

Data

Date ファイルを開きます。

Standards

Quantification 定量に関連した標準データを開きます。

Text

スプレッドシートファイルを開きます。

注意:キーボードの DELETE ボタンを押すとハイライトされたファイルを削除するコマンドになります。CTRL キーで複数ファイルを同時に開いたり(削除したり)できます。

Find

この機能は特定のサンプル名でディレクトリ内を検索し、そのサンプルを含んでいるファイルをロードします。Quantification, Multi Wavelength, Fraction Analysis にのみ限定。

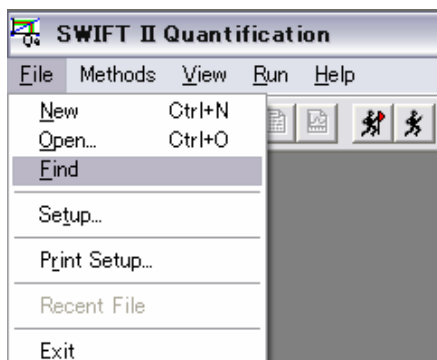



Figure.47－Find の選択画面

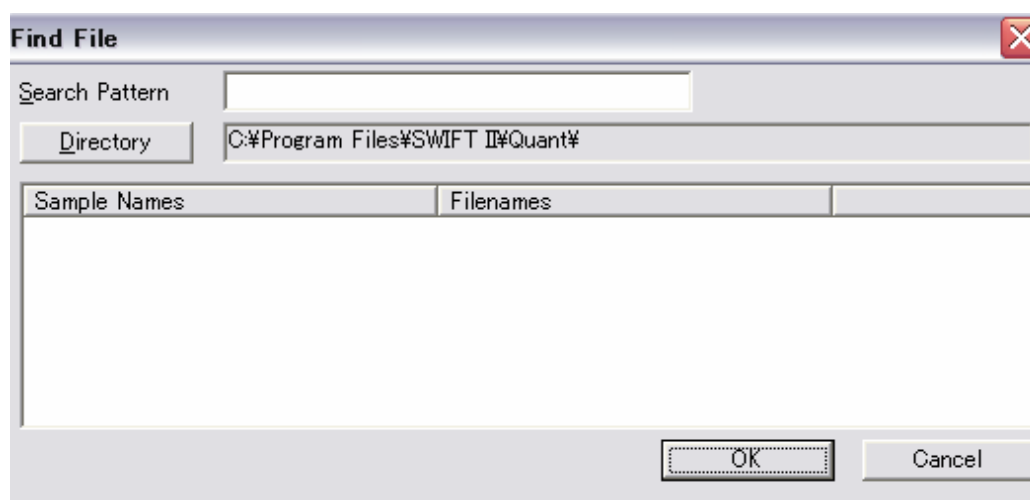



Figure.48－Find の設定画面

Close

このオプションは、選択しているビューを閉じます。

Save, Save As

これらのオプションはデータをファイルに保存します。正確な操作は現行の状況により異なるので、Method File、Data File、Standard File または Spreadsheet File のいずれかに保存されます。

Export

スプレッドシートでの読解に適したフォーマットでデータを保存します。Wavescan アプリケーションでは J-CAMP フォーマットでも保存でき、市販されている Multi Component Analysis ソフトパッケージなどに使用できます。

Set-up

このオプションはアプリケーションのさまざまな設定をするためのタブ付きダイアログボ

ックスを表示します。この章の「3.4　セットアップオプション」セクションをご覧ください。

Print

このオプションはレポートを印刷します。レポートのスタイルはビュータイプによって変化します。Group Report、Data Report、Spreadsheet Report が可能です。内容は、Set-up>Print Options ページ中の設定に依存します。

Print PreView

指定したプリントフォーマットのプリントプレビューを PC 画面に表示します。Set-up>Print Options ページでフォーマットを調整できます。

Print Set-up

プリンターを設定するために、Common Print Dialogue 機能を作動します。

Exit

アプリケーションを終了します。

3.3.2 Method（メソッド）

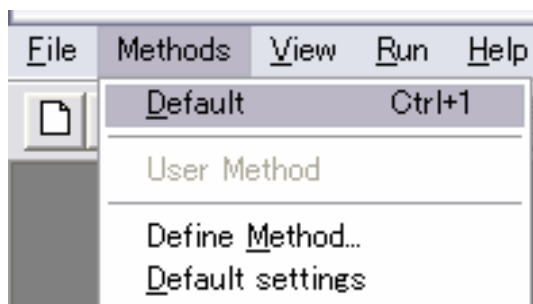



Figure.49－Default の選択画面

Default

ソフトウエアに予め設定されているメソッドで選択すると迅速にロードされます。

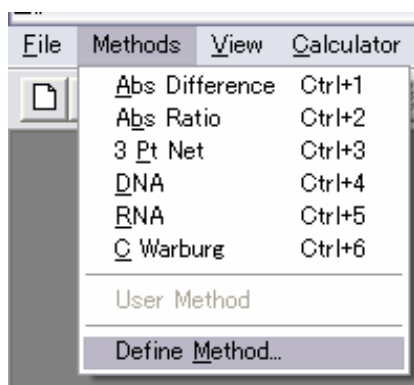



Figure.50－Method 選択画面

User Method

これはユーザーによって作成されたメソッドが、速くロードできます。最大 9 個のメッツソッドを設定できます。

Define Method

この機能では、ユーザー設定したメソッドを追加することができます。"Add"を押し、ダイアログボックスから必要なメソッドを選びます。メソッド名はテキスト上でダブルクリックして変更できます。メソッドと名前をハイライトして Remove を押すと User Method から削除されます。

Default Settings

derivatives の作成、ピーク検索、ピークエリア指定等の post run オプションを再設定できます。

Method （ Michaelis Menten View ）

ディスプレイモードを Michaelis Menten、Lineweaver Burke、Hanes Woolf または Eadie Hofstee から 1 つ選択できます。この方法は、全ての Data Set に適用できます。

3.3.3 Edit（編集）

このモードは、各アプリケーションでのデータがロードされているときにアクティブになります。各選択可能な内容はアプリケーションに依存します。

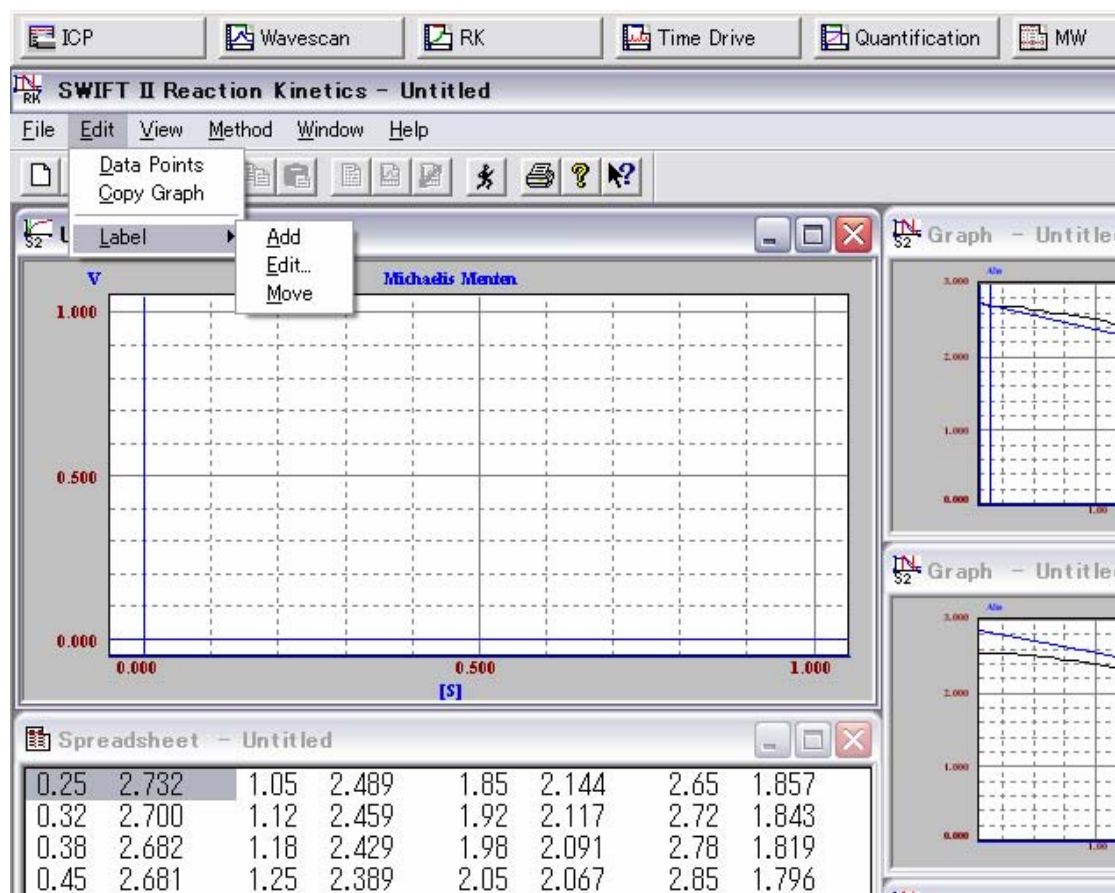



Figure.51－Edit 画面例

Spreadsheet View

スプレッドシートビューをディスプレイ／編集モードに切り替えます。データが読み取り専用の場合、この機能は使えません。

Sample List View

ランするサンプルのリストにサンプルを追加します。

Data Points（Michaelis Menten View）

ミカエリス・メンテンデータポイントの編集をします。データペアの付加と削除、そしてデータペア値の変更が含まれます。全てのデータセットからの全てのデータペアの呼び出しが可能です。

Clear（Group View List）

データセットからデータを削除します。データに関係しているビューはいずれも閉じられます。

Michaelis Menten View

ビューから全てのミカエリスメンテンデータセット を削除します。

Sample List

サンプルリストから全てのサンプルを削除します。

Results View

そのビュー内の全ての結果を削除します。

Merge

別グループ(別実験)のデータを 1 つのファイルにまとめます。この作業は View 内の Overlay 機能を使用する前に行ってください。Index ダイアログボックスをクリックし、Merge するファイルを選択してください。

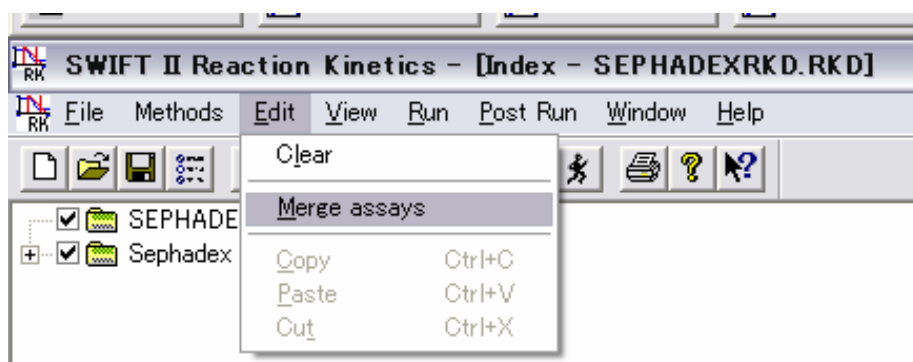



Figure.52－Merge 画面

Delete（Result View）

ビューから現行のアイテムを削除します。

Cut

クリップ・ボード(内部のクリップ・ボード)に選択したアイテムをコピーし、グループから削除します。

Copy

クリップ・ボード(内部のクリップ・ボード)に選択したアイテムをコピーします。

Paste

グループにクリップ・ボード(内部のクリップ・ボード)内のデータアイテムをペーストします。

Copy Graph

ビットマップとしてクリップ・ボードにビューをコピーします。

Data　選択されたデータをテキストフォーマットでクリップ・ボードにコピーします。

Results　クリップ・ボードに結果をテキストレポートのようにテキストでコピーします。

Label（Add、Edit、Move）

データビューにラベルを付加、編集、または移動します。このオプションはパレットから利用できます。グラフを表示する全てのビューに適用できます。

Define Region

グラフの範囲を設定します。設定された範囲内のデータはピーク探索時にコピー、スケールの修正またはデータ処理が可能になります。

3.3.4 View （ビュー）

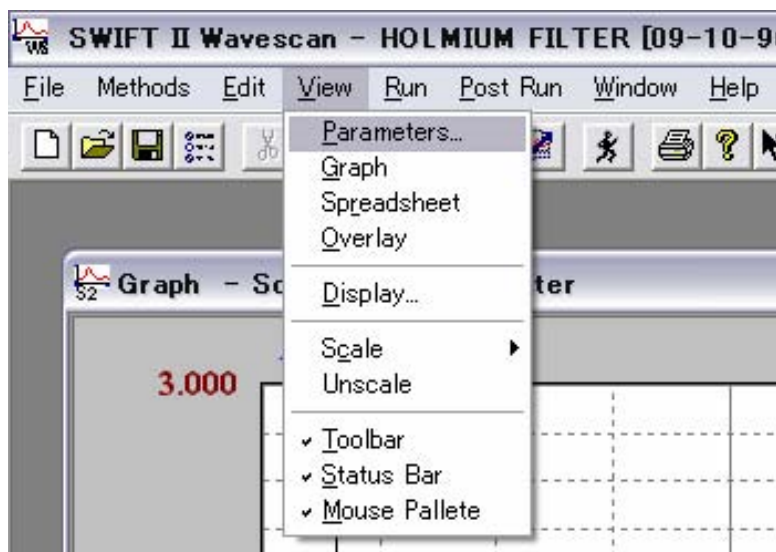



Figure.53－View 画面例

Parameters

現行データのパラメータを表示します。このオプションは ツールバーから利用できます。正確な機能は、モードに依存します。

オーバーレイビューはオーバーレイの内容と機能とオフセットを設定するオーバーレイパラメータを表示します。

デリバティブビューは修正、再計算用デリバティブパラメータを表示します。

他のビューはスタンダードデータパラメータを表示します。

Graph

現行データの他の データビューを表示します。このオプションは、ツールバーから利用できます。

Results

結果を表にして表示します。

Spreadsheet

現行データのスプレッドシートを表示します。すでに開いている場合は、最前面に表示されます。このオプションはツールバーから利用できます。

Overlay

オーバーレイビューを表示します。現行データを自動的にロードします。別々のグループ（実験）のデータの場合は Edit>Merge で初めにまずひとつにまとめてください。

Display

Set-up ダイアログのディスプレイページを開きます。選択されたビューオプションのみ変更できます。このオプションでは、スケールの設定、Grid（グリッド）をOn/Off することができます。同様にAbsorbance モードのデータを Abs または %T に設定することもできます。アプリケーションに特有のパラメータはここで On/Off ができます。

Scale（Auto、Full、Region、Zoom）

適切なスケーリング機能を適用します。Zoom はズームエリアをマウスで指定する必要がありますが、Auto、Full、そして Region はそのまま適用されます。

Results （Michaelis Menten View）

結果を表示します。次の 3 つの形式で結果を表にします。1 つのメソッドで複数のデータセットを比較、3 つのメソッドで 1 つのデータセットを比較、現行の方法を使って 1 つのデータセットを詳細に表示。これら3 つの方法はタブ付きダイアログボックスで表示されるため、3 つの形式間の切り換えが簡単です。

Unscale

Zoom と Scale オプションを回復します。

Toolbar

ツールバーの表示／非表示を選択します。

Status Bar（ アプリケーションコマンド ）

ステータスバーの表示／非表示を選択します。

Mouse Palette（ アプリケーションコマンド ）

マウスパレットの表示／非表示を選択します。

3.3.5 Run（実行）

現行のメソッドを実行します。詳細は関連したアプリケーションをご覧ください。

Figure.54－Run 選択画面例

Default

Standard スタンダードと呼ばれるメソッドをロードし、実行します。メソッドが見つからない時は、代わりにデフォルト値を使って新しいメソッドを作成し、実行します。

Method

現行のメソッドを実行します。また、必要な場合メソッドをロードして実行します。

3.3.6 Calculator（計算）

入力したオリゴヌクレオチドの塩基配列の理論的隔解温度を算出する Tm 計算機能を示します。

Multi Wavelength 多波長測定および Tm アプリケーションに含まれる機能です。

3.3.7 Post Run（ポストラン）

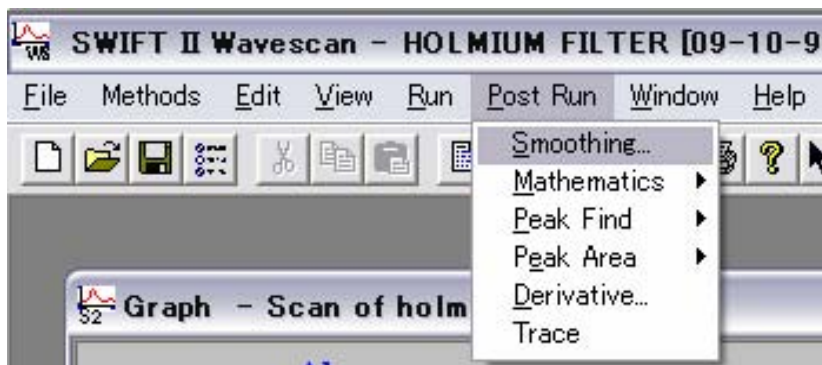



Figure.55－Post Run 選択画面例

Smoothing

選択したデータにスムージング機能（回旋フィルタ）を適用します。データポイント変換ルーチンは、step interval を増やすことができます。正確な操作は、アプリケーションに依存します。

Mathematics

数理ルーチン機能を選択したデータに使います。スキャン（またはアッセイ）データをそれぞれお互いに控除したり、定数を付加したりできます。各データポイントは Point を使って操作できます（吸光度比など）。正確な操作は、アプリケーションに依存します。

Peak Find

データに ピーク検索機能を適用し、画面上にピーク位置を表示して、ピーク情報を示すリザルトビューを作成します。この機能は、1 つのリザルトビューに対して全ての Peak Find Results を表にでき、ピーク、谷、そして変曲点を比較することができます。正確な操作は、アプリケーションに依存します。Peak Area ピークエリア（Dropped Baseline または Sloping Baseline）を任意で指定された領域から計算し、リザルトビューでエリア情報を示します。

Derivative

データにデリバティブ機能を適用し、デリバティブデータ結果をデリバティブビューに表示します。正確な操作は、アプリケーションに依存します。

Slope（Reaction Kinetics）

データにスロープ 機能を適用し、スロープ結果をリザルトビューに表示します。この機能は、1 つのダイアログボックスに全てのスロープ結果を表にすることもできるため、スロープを比較することができます。

Slope（Quantification)

Spline、Linear Regression、Linear Interpolation から曲線に適用させる機能を選択でき、ゼロ点を含むかも選べます。必要に応じて曲線を補外できます。

Tm Results

Tm 結果を表示します。

3.3.8 Window（ウィンドウ）

Tile

ディスプレイ上で見える全てのビューを並べて、メインウィンドウに全て表示します。

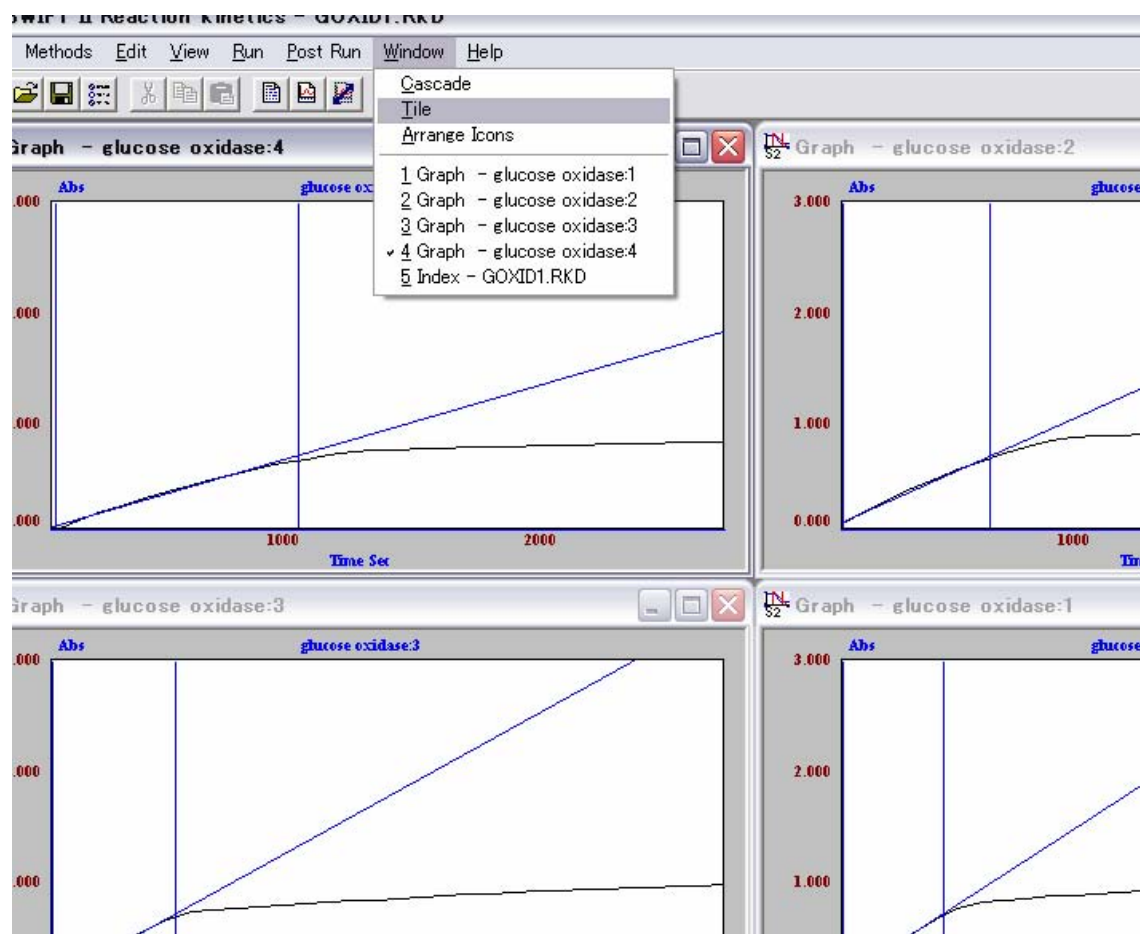



Figure.56－画面表示例（Tile 選択）

Cascade

全てのビューを順に重ねて表示します。

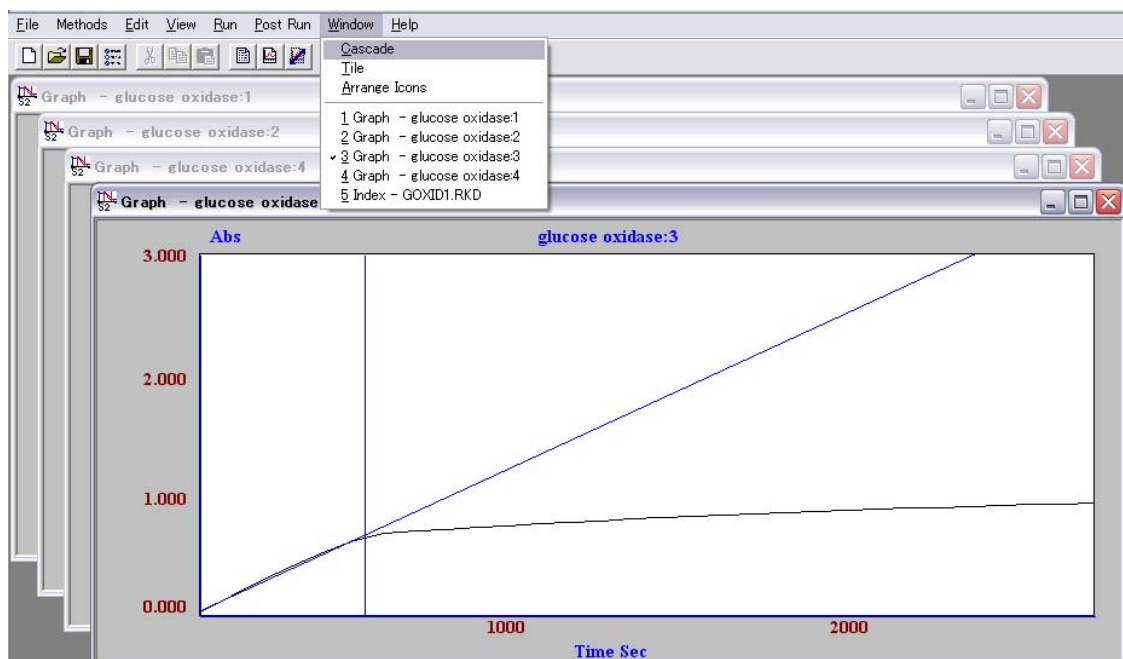



Figure.57－画面表示例（Cascade 選択）

Arrange Icons

メインウィンドウの下部に全てのアイコンを並べます。

View

特定のビューを選択し、それを前面に置き、必要に応じて拡大します。

3.3.9 Help（ヘルプ）

Using Help

ヘルプ機能の使い方を説明します。

Index

ヘルプ機能のインデックスを表示します。

About

製作者の情報を表示します。

3.3.10 Run time Menu（ランタイムメニュー）

Abort

スキャン ／アッセイを中止します。表示されているダイアログボックスでは、現行のデータを保存したり、必要に応じて破棄したりできます。使用中のアプリケーションや接続されている分光光度計によっては、すぐに中止が実行されないこともあります。

Display Hide / Show

Run display ステータスボックスを表示（Show）または非表示（Hide）します。

Scale

集められたデータに Full Scale か Auto Scale 機能を適用し、新しいスケールで再びグラフを表示します。

Pause / Start

Reaction Kinetics にのみ適用できます。マルチポイントカイネティクスが実行できるように、アッセイを一時停止／再始動します。

Next

Reaction Kinetics のシリアルカイネティクスモードにのみ適用できます。現行のアッセイを終了しリストの次アッセイを開始します。

3.3.11 Mouse options（マウスオプション）

Figure.58－マウスパレット

Zoom

マウスで領域を指定すると、グラフ中のその領域を拡大できます。グラフが再プロットされた後でこの領域のデータ軸が設定されます。

Label

グラフにラベルを付加します。ラベルの開始点からマウスでドラッグし、ダイアログボックスにテキストを入れます。

Move

アイテム（Label、Offset、Peak area）をマウスのドラッグで移動します。

Trace

データ上でマウスをロックし、細十字線のポイントを移動してデータ値を確認できます。

Define Region

グラフ上で指定する領域を示します。一度領域を指定すると、その領域を編集するた

めのポップアップメニューが表示されます。指定した領域に適用できるオプションはアプリケーションにより異なります。

Copy Data　領域内のデータを、新しいウィンドウにコピー。

Autoscale　与えられた範囲内で グラフが自動スケール化。

Peak Area　領域をピークエリア、dropped ベースライン、sloping ベースラインとして設定し、他のピーク情報に付加します。

Peak Search　領域内のエリアにピーク検索機能を適用します。

Slope Region　指定された領域内の勾配を計算します。

3.4 Set-up（セットアップオプション）

Figure.59－Setup オプションページ

Set-up には多くのオプションが含まれているため、別途説明します。実際の内容はアプリケーションによって異なりますが、パラメータとオプションは共通しています。

3.4.1 Print Option（プリントオプション）

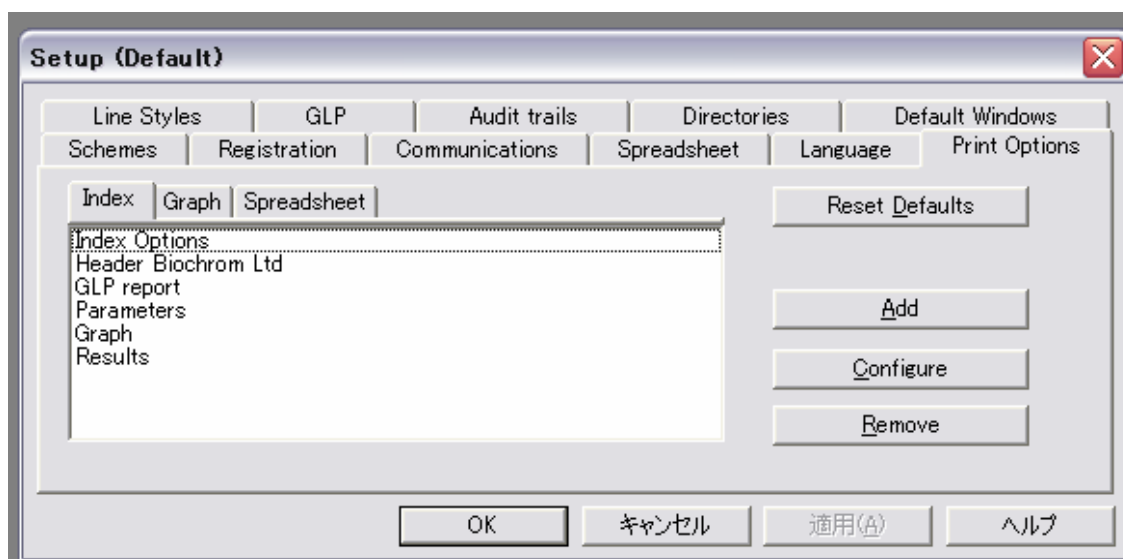



Figure.60－Print Option 設定画面

このオプションではレポートのプリントアウトをカスタマイズすることができます。適切なレポートフォーマットを選ぶために Print Preview と合わせて使用してください。

Wavescan、Reaction Kinetics、Time Drive および Tm モジュールではデータのグループ（プリントアウトには Index Window アイコンを選択）、各々のグラフ（プリントするデータウィンドウを選択）、スプレッドシート形式に合わせてレポートをカスタマイズできます。Reaction Kinetics モジュールでは Michalis Menten 機能のプリントアウトもカスタマイズできます。

Quantification、Multi Wavelength および Fraction Analysis モジュールではグラフがひとつしか表示されないので他のグラフをカスタマイズすることはできません。

各レポートは様々な要素から構成されていますが、Add や Remove ボタンを使って任意の順序に変えることができます。Configure ボタンはプリントアウト内容をさらにカスタマイズするオプションを呼び出します。Print Preview はプリント前のチェックに便利です。Reaction Kinetics ではさらに Michaelis Menten プリントアウトをカスタマイズできます。

Index Options

このオプションは、 Group Report のためのデフォルトオプションです。削除はできません。データセットをそれぞれ別々に印刷するか、1 つのレポートにまとめるかを決定します。Overlay などのような全ての共通のビューを含むオプションも選択できます。

Header

このオプションは、最初のページのヘッダーの設定をします。ヘッダーは、日付と時間、ダイアログボックスから入力するタイトルを含みます。タイトルは Registration で入力したデフォルトになっています。

GLP Report

このオプションは、データとともに保存されている GLP レポートを Report の一部にします。PC 画面上でみることもできます（この場合 Set-up 内の GLP と Print with Data Log オプションを選択する必要があります）。Set-up>GLP の GLP オプションが選択されていない場合は適用しません。

Parameters

このオプションは、レポートに関係しているパラメータ／メソッドを印刷します。リストとして個別にプリントするか、グループ化して表にすることができます。オーバーレイビューを印刷する場合、全てのパラメータを表示するオプションが含まれます。

Graphs

このオプションは、レポートに関係しているグラフをプリントします。グラフのサイズおよびグループとしてグラフをプリントするオプションはそれぞれ自由に変更することができます。

Results

このオプションはレポートに関係している結果または表をプリントします。結果は表にすることも、個別にプリントすることもできます。

Data Points

このオプションは、データポイントのリストを含みます。

Form Feed

このオプションは、レポート中の任意の位置に形式を追加しグラフや結果を別紙にプリントします。

Text

このオプションは、テキストファイルをレポートに挿入できます。ファイル名をページの左、中央または右にテキストをプリントするオプション選択できます。テキストファイルは、フォーマットコードを含むことができます。

以下のように { }のテキストはコントロールコードとして扱われます。

{Cnn} コラム nn においての次行を開始します。

{Ffbu} 次のテキストはフォントサイズ f 、太字 b または下線 u フォントを使用します。

実際のレポートは、アプリケーションによって異なります。

3.4.2 Line Styles（ラインスタイル）

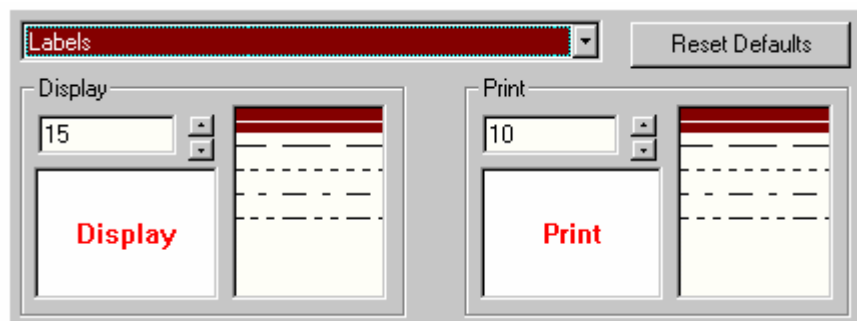



Figure.61－Line Style 設定画面

このオプションは、各アプリケーションで表示とプリントに使用される色とラインスタイルを設定します。目的に応じて Colour（色）、Line style（線種）、Font Size（フォントサイズ）を変更できます。各アイテムに、プリントと表示用に異なるパラメータを割り当てることができます。

アイテムはスクロールバーから選択します。アイテムをハイライトして Display または Print をダブルクリックし、目的の色をパレットから選びます。

3.4.3 GLP

このオプションはGLPの情報を収集するかどうか設定します。GLP Enabledをオンにすると、装置のスイッチを入れて約10分後キャリブレーション終了時にGLPレポートがプリントアウトされます。GLP 情報はデータ同様保存できます。

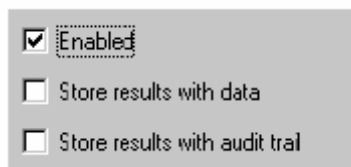



Figure.62－GLP 設定

3.4.4 Audit Trail（監査トレイル）

このオプションは全てのデータおよび操作内容（スキャン、読取り、インスツルメントコマンドまたはユーザーコマンドを実行したかどうか）を記録し、Audit Trail テキストファイルに関連データファイルとともに保存することができます。データは、*.LOG 拡張子のテキストファイルとして保存されるので、NotePad または WordPad を使って、レビューできます。特定のアプリケーションをパスワードで監査用にロックすることもできます。詳しくはセクション 1-7 をご覧ください。

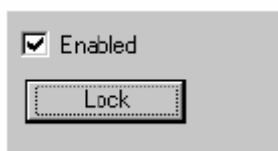



Figure.63－監査トレイル設定

3.4.5 Directories（ディレクトリ）

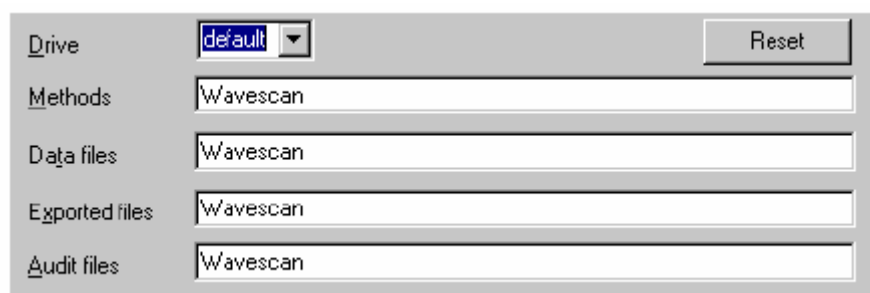
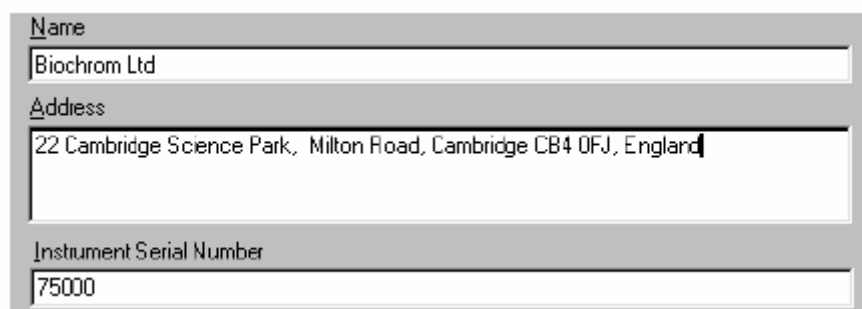



Figure.64－Directories 設定

このページは、デフォルトディレクトリ（正確にはフォルダ）を設定し Method、Data、

Exported、Audit Trail ファイルに保存します。各アプリケーションのディレクトリは、アプリケーション名に由来しています。他のドライブも使用できますが、ルートディレクトリには A:と B:のみ利用できます。デフォルトドライブでアプリケーションにアクセスします。

3.4.6 Registration（登録）

このオプションでは、ユーザーと装置の情報を入力できます。プリントされるレポートの最上部に予め表示されるように設定されています。シリアルナンバーを入力し、ソフトウエアを作動します。シリアルナンバーがまちがっているとソフトウエアは作動しません。

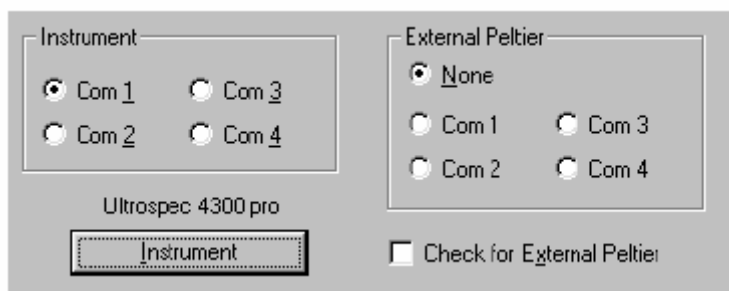



Figure.65－登録ページ

3.4.7 Communications（コミュニケーション）

このオプションは、機種（Ultrospec 2000、3000、4000 ）を設定します。コミュニケーションポートを、接続に応じて設定します。外部ペルティエ装置を使用する場合も同様に設定します。

Figure.66－接続設定

3.4.8 Spreadsheet（スプレッドシート）

このオプションは、 スプレッドシート形式でデータを保存する時にスペーサーとして使う記号を設定します。予め Microsoft Excel には Tab が設定されています

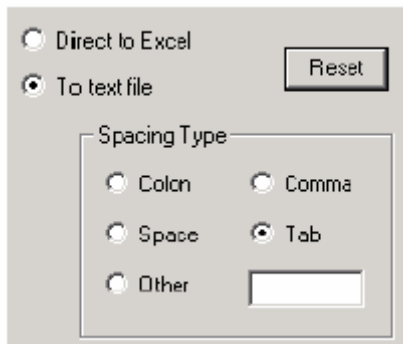



Figure.67－データ保存選択

3.4.9 Default Windows（デフォルトウィンドウ表示）-WS、RK、TD、Tm

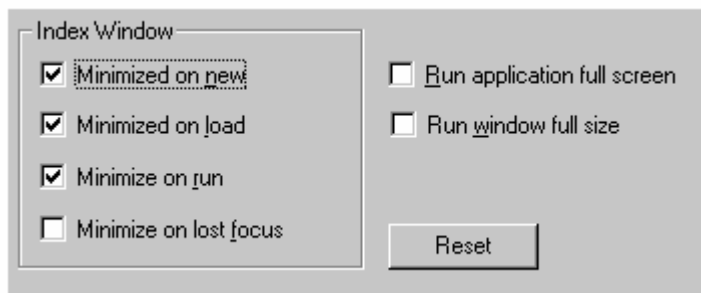



Figure.68－デフォルトウィンドウ表示設定-WS、RK、TD、Tm

このオプションでは Index Window を new、load、run および lose focus（他ウィンドウが選択された場合）で、自動的に最小化して表示するよう設定できます。これらオプションを予め選択しておくことをおすすめします。また、選択したアプリケーションウィンドウをディスプレイスクリーン大に拡大するか、ビューウィンドウ（post run オプションの表を含む）をディスプレイスクリーン大に拡大するかを選ぶこともできます。

3.4.10 Default Windows（デフォルトウィンドウ表示）-QA、MW、FA

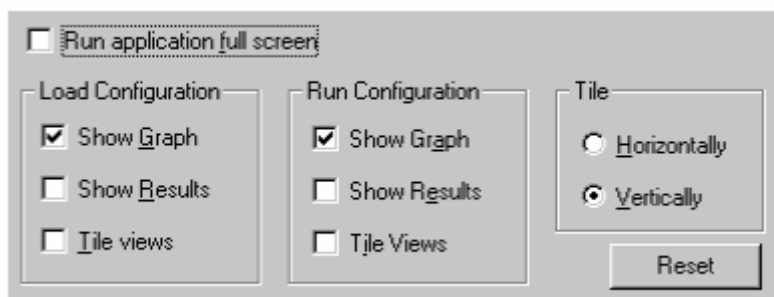



Figure.69－デフォルトウィンドウ表示設定-QA、MW、FA

このオプションではアプリケーションウィンドウをディスプレイスクリーン大に拡大するか、ラン実行前後に何を表示するかを選択できます。Tile ビューを選択した場合はスクリーン大にウィンドウが拡大されます。
Multi Wavelength（多波長）アプリケーションはグラフ表示されないため、このオプションについて多少制限があります。

3.5. Application Windows and Views（ウィンドウおよびビュー）
3.5.1 Main Window（メインウィンドウ）
全てのアプリケーションで使用されるメインウィンドウにはタイトルバー、メニューバー、ツールバーそしてステータスバーがあり単独でコントロールできる複数のビューウィンドウが含まれます。メインメニューバーがビューウィンドウの内容にあわせて変化するため、ビューウィンドウにはメニューバーがありませんが、各々のコントロールバーがあります。メインウィンドウ は、アプリケーション全体にわたってデータウィンドウを保持し、コントロールします。

Figure.70－メインウィンドウ例
メインウィンドウはアプリケーションのセットアップや書類の作成、ロードのための機能等、固有のデータやビューと関連のない全ての基礎機能を含みます。

File	Method	View	Run	Help
New	Method A	Toolbar	Default	
Open	Method B	Status Bar	Method	
Setup	Define Method	Mouse Palette		
Print Setup	Default Settings			
File A				
File B				
Exit				

Figure 26 - Typical Application Main Menu

Figure.71ーメインメニュー例

ビューは、メインウィンドウ内のウィンドウで、個々のタイトルバーを持ち境界線で囲まれています。このウィンドウは(メインウィンドウ内に)アイコン化できます。ビューウィンドウは、データを様々な形で表示します。これらのビューウィンドウは他のアプリケーションウィンドウと同様に扱うことができますが、メインウィンドウ内での操作に制限されます。ビューウィンドウには独自のメニューがあり、作動中はメインメニューをビューウィンドウではなくメインウィンドウに表示します。

3.5.2 Group Tree View(グループツリービュー)

このビューは、グループの構造と内容を表示します。これはツリーの形で情報を表示します。グループ名、その中に保存されたデータ、ビューがあります。グループ ツリー(またはコンテンツビュー)内のアイテムはツリー構造内の ＋－ ボタンを使って拡大・縮小できます。 記号はアイテムが選択されているかどうかを示します。

Figure.72ーグループツリービュー例

このビューは new、load、 run および focus 変更時(他ウィンドウが選択された場合)に自動的に最小化することができます。

グループ内の全てのファイルをアクティブするにはマージン変更またはプリント前にアイテムを選択しておいてください。

File	Method	Edit	View	Run	Post Run	Window
New	Method A	Clear	Parameters	Method	Smoothing...	Cascade
Open...	Method B	Merge	Graph		Mathematics...	Tile
Close	Define	Cut	Spreadsheet		Peak Find...	Arrange Icons
Save	Defaults	Copy	Overlay		Peak Area...	View A
Save As...		Paste	Display...		Derivative	View B
Export			Scale			
Setup...			Unscale			
Print			Toolbar			
Print Preview			Status Bar			
Print Setup...			Mouse Palette			
File A						
File B						
Exit						

Figure.73－グループメニュー例

3.5.3 Data View（データビュー）

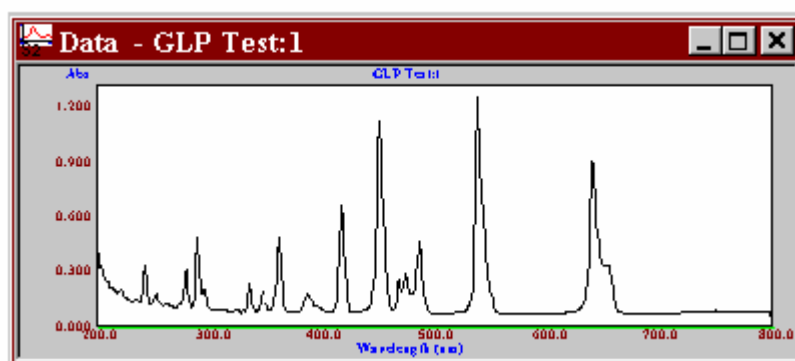



Figure.74－Data View 例（Wavescan グラフ）

このビューは、データを X 軸に対してプロットしたグラフで表示します。スケールは、オートスケール、ズーム、固定領域のいずれかをView メニュー内 Scale コマンドで設定できます。カーソルを使ってデータ中の特定の項目を指し示したり、ラベルをビュー上で付加したりして（Edit メニューの label コマンドで設定）情報を見やすく強調することができます。アプリケーションには、データ毎に複数のデータビューがあり、各ビューは、異なる表示値を持つことができます。このビューはまた、アプリケーションによって得られたスロープ、ピークデータ、ラベルなどを表示します。グリッドはオプションであり（View メニュー内の Display コマンドで設定）、ラインスタイルと色はユーザーが定義します（3.4.2 をご参照ください）。グラフのフォーマット化にはパラメータ設定を使用します。

File	Method	Edit	View	Run	Post Run	Window
New	Default	Clear	Parameters	Method	Smoothing...	Cascade
Open...	Method A	Copy Graph	Graph		Mathematics...	Tile
Close	Define....	Copy Data	Spreadsheet		Peak Find...	Arrange Icons
Save	Default....	Labels	Overlay		Peak Area	View A
Save As...			Display...		Derivative	View B
Export			Scale		Trace	
Setup...			Unscale			
Print			Toolbar			
Print Preview			Status Bar			
Print Setup...			Mouse Palette			
File A						
File B						
Exit						

Figure.75ーデータメニュー例

3.5.4 Spreadsheet Data Points View（スプレッドシートビュー）

Spreadsheet - GLP Test:1

200.0	0.385	208.0	0.233	216.0	0.175	224.
201.0	0.303	209.0	0.228	217.0	0.169	225.
202.0	0.313	210.0	0.193	218.0	0.170	226.
203.0	0.298	211.0	0.201	219.0	0.178	227.
204.0	0.272	212.0	0.197	220.0	0.182	228.
205.0	0.253	213.0	0.189	221.0	0.173	229.
206.0	0.241	214.0	0.182	222.0	0.158	230.
207.0	0.236	215.0	0.176	223.0	0.144	231.

Figure.76ースプレッドシート表示例

このビューは、 スプレッドシート形式でデータを表示します。データポイントはカラムに一覧化され、Edit（編集）モードを選択して編集できます。各データポイントは、波長、時間、サンプル番号などのアプリケーションに応じた測定項目値、それに該当する吸光度値を含みます。

Edit（編集）モードでは、ダイアログバーはビューの上位にあり、現在選択されている測定項目値とデータポイントを表示します。このデータポイントは新しい値で編集することができます。入力した値は、 記号を選択して決定します。カーソルを他のセルへ移動するか、あるいは X 記号を選択することにより、もとの値を復帰できます。データセットあたりスプレットシートビューひとつを作成できます。 データフォーマットと測定項目値の長さにより、データは 1 つまたは複数のカラムに分けて表示されます。

File	Edit	View	Window
New	Edit	Parameters	Cascade
Open...	Clear	Graph	Tile
Close	Copy	Toolbar	Arrange Icons
Save		Status Bar	View A
Save As...		Mouse Palette	View B
Setup...			
Print			
Print Preview			
Print Setup...			
File A			
File B			
Exit			

Figure.77－スプレッドシートメニュー例

3.5.5 Derivative View（デリバティブビュー）

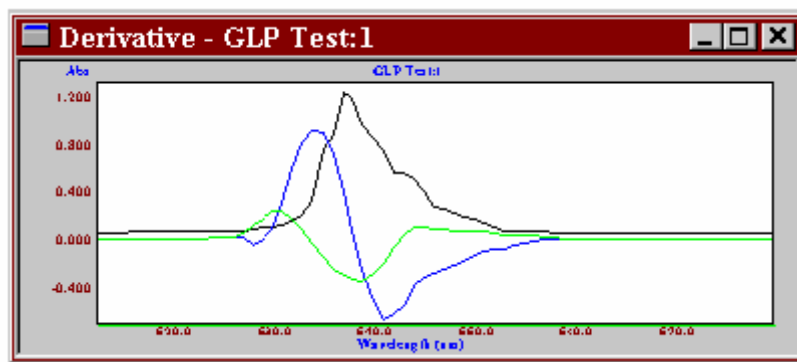



Figure.78－Derivative View 例

このビューはもとのデータに上書きしたデリバティブデータを表示することを除いては、データビューに相似ています。データごとに複数のデリバリティブを表示でき、各ビューごとに異なる表示も可能です。このビューでは、使用されたラベルも表示します。

File	Edit	View	Post Run	Window
New	Copy Graph	Parameters	Peak Find	Cascade
Open...	Label	Display...	Peak Area	Tile
Close		Scale	Derivative	Arrange Icons
Save		Unscale	Trace	View A
Save As...		Toolbar		View B
Setup...		Status Bar		
Print		Mouse Palette		
Print Preview				
Print Setup...				
File A				
File B				
Exit				

Figure.79－Delivative メニュー例

3.5.6 Results View（リザルトビュー）

Peak Results

Scan of holmium filter:2 | Peak Find | Absorbance | 1.0

No.	Peak Type	Position	Height
1)	Peak	333.9	0.172
2)	Peak	360.8	0.614
3)	Peak	382.2	0.104
4)	Peak	418.9	0.195
5)	Peak	445.8	1.671
6)	Peak	453.2	0.690
7)	Peak	459.9	0.787
8)	Peak	537.1	0.272

Figure.80－リザルトビュー例

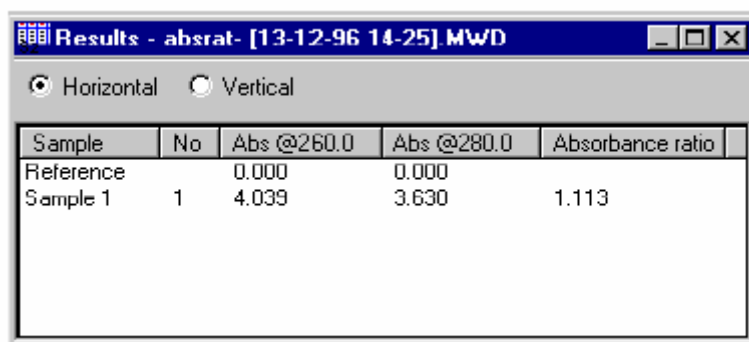
このビューは、フォームビューです。結果値はアプリケーション毎に適当なダイアログフォーマットを使って表示します。リザルトビューは、各アプリケーションによって異なり、その内容は関連したアプリケーションのセクションで説明しています。リザルトビューには他のビューと同様メニューとさらにいくつかのボタンとコントロールがあります。

File	Edit	View	Post Run	Window
New	Clear	Parameters	Peak Find	Cascade
Open...	Delete	Graph	Peak Area	Tile
Close		Toolbar		Arrange Icons
Save		Status Bar		View A
Save As...		Mouse Palette		View B
Export				
Setup				
Print				
Print Preview				
Print Setup				
Exit				

Figure 36 - Typical Results Menu

Figure.81ーリザルトメニュー例

3.5.7 Sample Results View（サンプルリザルトビュー）

Figure.82ーサンプルリザルトビュー例

このビューは、Multi Wavelength、Quantification、および Fraction Analysis アプリケーションで使用したサンプルのリストを作成、保存、編集することができます。メソッドにはパラメータ設定とサンプルリストがあるため、このセクションではサンプルリストを扱います。

Figure.83－サンプルリザルトメニュー例

3.5.8 Overlay View（オーバーレイビュー）

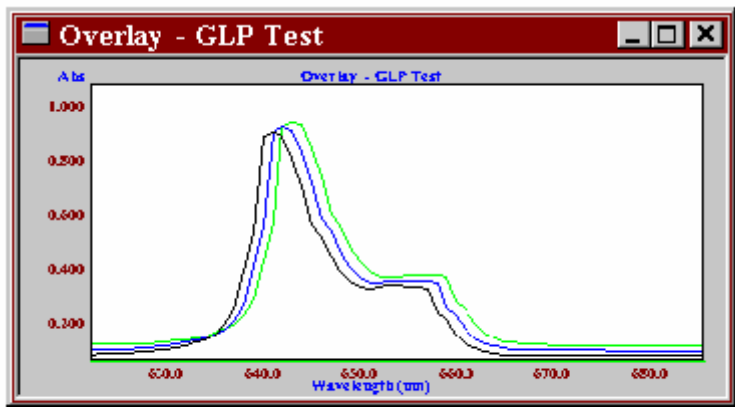



Figure 39 - Typical Overlay View (Wavescan)

Figure.84－オーバーレイビュー例

このビューは特定のデータとは関連していませんが、指定されたデータをオーバーレイするために必要なデータをデータセットから取り込みます。このオプションは現在のグループ範囲内のデータのみオーバーレイできます。他のデータをオーバーレイためには、そのデータが入っているファイルを Edit>Merge でまとめてください。オーバーレイビューは選択されたデータで作成されますが、さらに追加したり削除したりできます。データを個々のプロットを分けるために、オフセット値をオーバーレイ範囲内に使用します。このビューでは、使用されているラベル、スロープ、ピークデータを（View メニュー内の Display コマンドで）表示します。オーバーレイビューは複数作成できます。

File	Edit	View	Post Run	Window
New	Clear	Parameters	Peak Find	Cascade
Open...	Copy Graph	Display...	Peak Area	Tile
Close	Label	Scale	Derivative	Arrange Icons
Save		Zoom	Trace	View A
Save As...		Toolbar		View B
Setup...		Status Bar		
Print		Mouse Palette		
Print Preview				
Print Setup...				
File A				
File B				
Exit				

Figure.85－オーバーレイメニュー例

3.5.9 Michaelis Menten View（ミカエリス・メンテンビュー）

このビューは特定のデータ配列と関連していませんが、ロードされているアッセイから得られるデータを持っています。ミカエリス・メンテンビューはアプリケーションの View メニューから作成されます。

以下の定義をご参照ください。：

・データポイントはカイネティックス解析の濃度とスロープから成ります。

・データセットは、スロープとインターセプトを得るために分析された複数のデータポイントから成ります。

このビューは少なくともひとつあるいはそれ以上のデータセットのプロットにより構成されており、さらに結果を得るために使用されるスロープ、インターセプトも含みます。グラフは Michaelis Menten、Lineweaver Burke、Hanes Woolf、Eadie Hofstee の 4 種類から選択して表示することができます。
ビューは複数のデータセットを表示できるので、ミカエリスメンテンプロットを相互比較した（ Overlaid ）結果を表にすることができます。

File	Edit	View	Method	Window
New	Data Points	Results	Michaelis Menten	Cascade
Open...	Copy Graph	Display Grid	Eadie Hofstee	Tile
Close	Label	Display Intercepts	Lineweaver Burke	Arrange Icons
Save		Toolbar	Hanes Woolf	View A
Save As		Status Bar		View B
Export		Mouse Palette		
Setup...				
Print				
Print Preview				
Print Setup...				
File A				
File B				
Exit				

Figure.86－Michaelis Menten メニュー

3.5.10 Run View（ランビュー）

このビューは実験中にのみ表示される特別なビューで、集められたデータを表示します。このビューは、データが集められている間、アプリケーションウィンドウ大に拡大されます。

メニューにあるコマンドは、実験および実行中に停止する必要が生じた他のアプリケーションを停止するコントロール機能です。

ビューには、現在の分光光度計の状態を表示するステータスバーがあり、集められた結果を表示するコントロールバーをオプションで表示することもできます。

Abort	Show Display	Scale
		Full Scale
		Auto Scale

Figure.87－Run View メニュー例

3.6 Post Run and Other Functions（ポストランと他の機能）

3.6.1 Smoothing（スムージング）

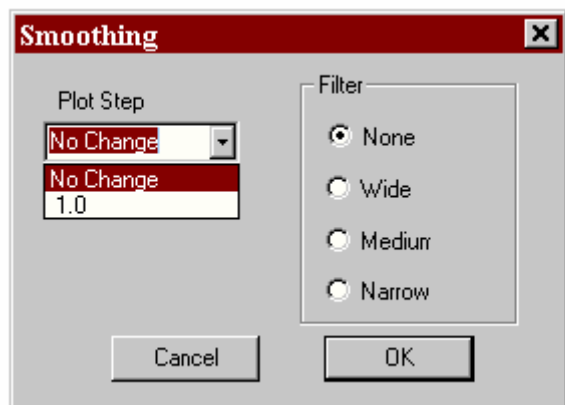



Figure.88－Filter 選択画面

この機能は、グラフのスムージングを実行します。これは plot step の変更によるデータの平均化機能、様々な幅の回旋フィルターによるスムージングを含みます。

3.6.2 Tm Calculator（Tm 計算機能）

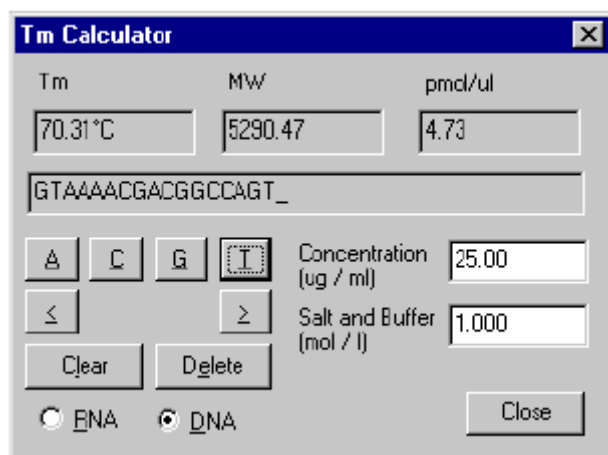



Figure.89－Tm 値計算

Tm 計算機能は Multi Wavelength および Tm アプリケーションに含まれており、既知塩基配列をもつオリゴヌクレオチドの理論的 Tm 値を既知の熱力学値をもとに計算します。

塩基配列は RNA あるいは ssDNA サンプル（前者では T の代わりに U 使用）として画面に入力します。計算式が適合される範囲は 16−64mer です。

オリゴヌクレオチドの液中濃度（ug／ml）と塩およびバッファーの合計モル濃度（mol／l）を入力します。＜　＞キーを使って配列中に塩基を挿入できます。

この計算機能では、オリゴヌクレオチドの分子量および濃度（pmol／ul）を表示するためシークエンシングなどに便利です。

背景にメソッドがロードされている場合は、計算値をプリントすることもできます。

3.6.3 Mathematics（計算機能）

計算機能は、2 つのオプションから構成されており、Scan スキャンデータ（Wavelength Scanning）および Assay アッセイデータ（Reaction Kinetics、TimeDrive）を操作します。

1）Scan and Assay（スキャン／アッセイにおける計算機能）

スキャン、アッセイは他のスキャンやアッセイと加減乗除でき、別のスキャン／アッセイ領域内に保存された新しい結果と共に記録できます。

注意：データはAbsorbance吸光度モードにおいてのみ操作されます。%T モードでデータを操作すると、吸光度に変換され、%T では新たに表示されます。

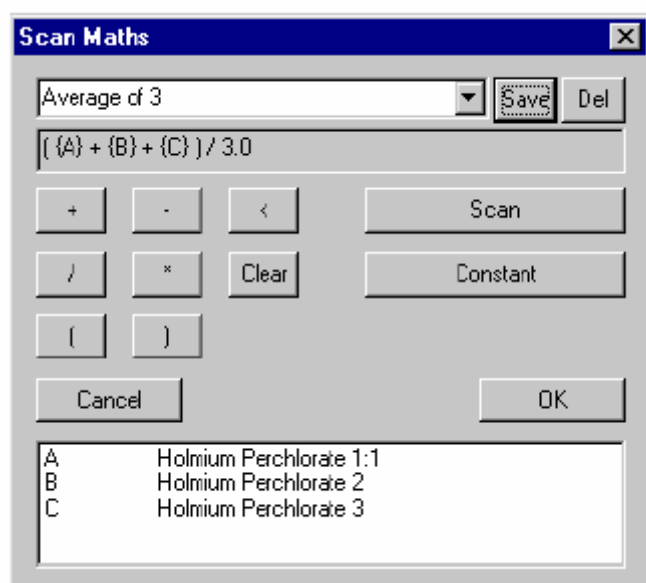



Figure.90－計算式入力画面例

Scan Maths／Assay Math 機能はスキャン／アッセイ結果と定数を使って、方程式を

作ることができます。操作するスキャン／アッセイはすべてと同じグループ内にまとめて（Merge 機能）あらかじめ背景に立ち上げておきます。これらは Scan／Assay ボタンで選択でき、タイトル一覧はダイアログボックスに表示されます。選択されたスキャン／アッセイにはこれらの情報が表示されるボックスの下部に示されます。方程式は順に特定されますので、テキストボックスをハイライトして内容を入力して保存できます。

スキャン操作機能は、異なるタイプのデータを並べることができます。異なる軸を用いたスキャンまたはアッセイについては、データは最大公約数まで約分することが必要です（例えば 1nm とか最大公約期間など）。
2）Point（ポイント）

Point Maths 機能により、定数と特定の吸光度値を使って計算できます。例えば、360nm における吸光度に 14 を掛けたことを示しています。この機能は特定のスキャンにおける吸光度比を検出するために、また特定吸光度に入力したファクターを掛け合わせて濃度を算出するために利用できます。このような計算式はテキストボックスをハイライトして内容を入力し保存できます。

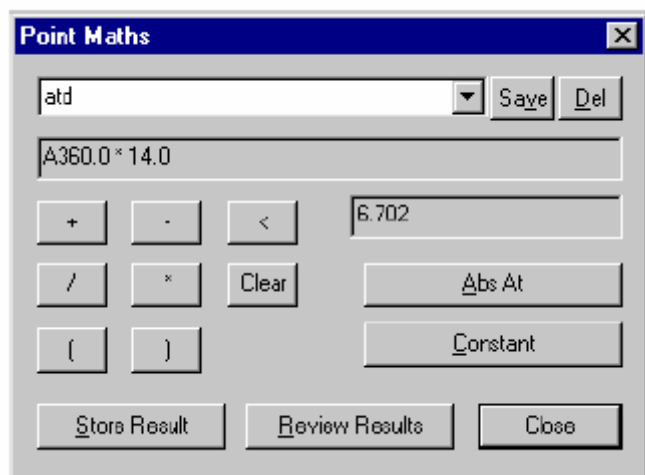



Figure.91－計算式入力画面例
複数の点を操作し、もとのスキャン／アッセイデータとともに保存、プリントできます。各操作時に Store Result を押し、Review Result で確認してください。プリント時には Print を押すか、またはオプションを閉じて File>Print オプションを選んでください。核酸スキャンでは（Abs260 x 50）および（Abs260 ／280）が実測スキャンとともにプリントできま

す。

3.6.4 Peak Find（ピーク検索機能）

この機能は Peak Search のアルゴリズムを実行します。ピーク検索実行前に Default Setting メニュー内の Search オプションで設定できます。これらのパラメータは機能を使用するとロードされ保存されます。

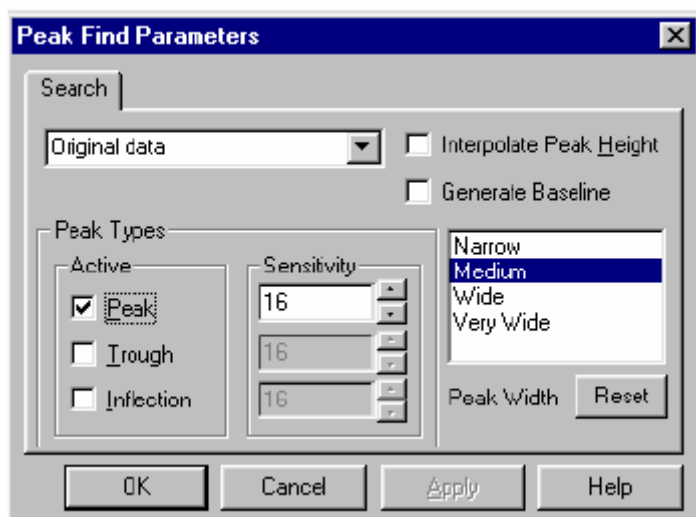



Figure.92ーピーク検索設定画面

Peak Search ページは、ピーク領域パラメータをカスタマイズできます。この機能は、Peaks（ピーク）、Troughs（谷）、Inflection Points（変曲点）の検索を設定できます。感度値はそれぞれに定義できます。Peak Width（ピーク幅）も、広いピークと狭いピークを考慮に入れれるようにセットできます。さらに、補入されたピークの高さを計算するように設定することもできます。

Peak Results

Scan of holmium filter:2 | Peak Find | Absorbance | 1.0

No.	Peak Type	Position	Height
1)	Peak	333.9	0.172
2)	Peak	360.8	0.614
3)	Peak	382.2	0.104
4)	Peak	418.9	0.195
5)	Peak	445.8	1.671
6)	Peak	453.2	0.690
7)	Peak	459.9	0.787
8)	Peak	537.1	0.272

Figure.93ーピーク検索結果表示例

ピーク検索の結果は、Peak Find Results ビューに表示されます。ピーク検索の結果は、

同時に表示された異なるスキャンの中で一致するすべてのピークをリストまたは表にして表示できます。これらの結果は File>Print オプションでプリントできます。

3.6.5 Peak Area（ピーク領域機能）

この機能は Peak Area のアルゴリズムを Dropped Baseline または Sloping Baseline 方式で実行します。

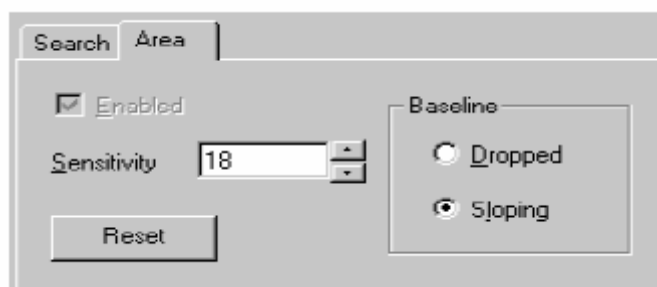



Figure.94－ピーク領域決定パラメータ

Peak Area コマンド内の Define Area オプションで Dropped Baseline から Sloping Base Line を選択すると、ピーク領域をマウスで定義できます。スロープ感度で設定された開始・終了点の間の領域を計算します。

Peak Results

Scan of holmium filter:2 | Both | Absorbance | 1.0

No.	Peak Type	Position	Height	Area	Start	End
1)	Peak	445.8	1.671	0.0%		
2)	Peak	453.2	0.690	0.0%		
3)	Peak	459.9	0.787	0.0%		
4)	Area			100.0%	438.3	468.4

Figure.95－ピーク領域検索結果例

ピーク領域検索の結果は、Peak Area Results ビューに表示されます。ここではピーク領域と定義領域の開始・終了に波長が示されます。ピーク領域は%Area として定義することもできます。

3.6.6 Derivative（微分機能）

微分機能は、1 次、2 次、4 次微分を実行し、データをデリバティブビューに保存します。

これらの機能は微分パラメータと結果をフォーマット、表示、印刷することもできます。

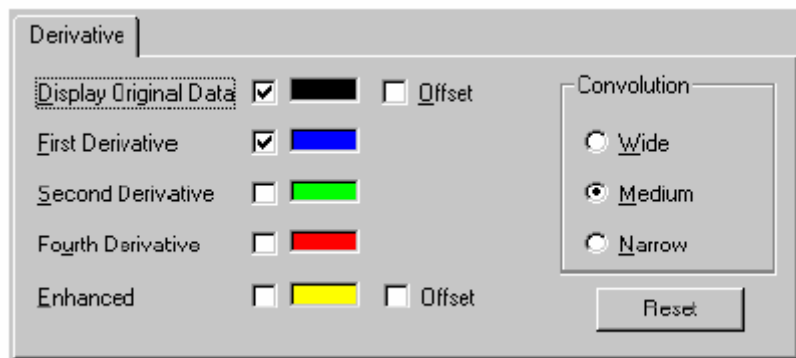



Figure.96－微分パラメータ選択画面

各アプリケーションでは微分ビューをカスタマイズできます。オプションとして、1 次、2 次、4 次微分および、もとのデータを強調する Enhanced があります。各微分グラフでは、もとのデータの様に同じグラフに合うようにそれぞれスケールを調節します。その際もとのデータは X 軸のゼロ値に合わせることもオプションで選べます（オートスケールを選択するようお薦めします）。アプリケーションでピーク検索機能が使える場合は、それを微分データに適用できます。

アプリケーションによっては、1 次微分のみが算出可能で、その場合関連したパラメータだけが利用できます。

微分グラフの両端が短く見える理由はアルゴリズムに必要なデータポイントの数によるものです。その度合はたたみ込み（合成積）と感度設定により変化します。

3.6.7 Overlay（オーバーレイ機能）

オーバーレイ機能はオーバーレイビューとオーバーレイデータのスケール調節、表示、管理を行います。これはオフセットの適用、グループとしてのデータ配列管理、そしてオーバーレイデータ、結果、パラメータの表示とプリントを含みます。

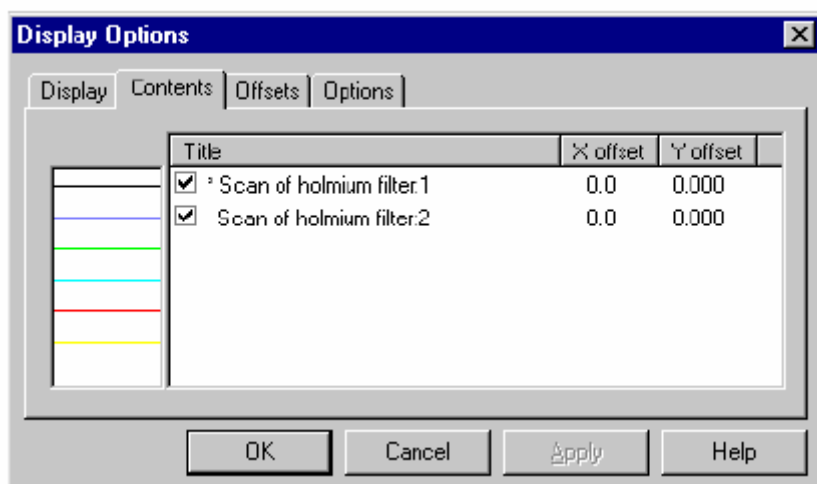



Figure.97－オーバーレイパラメータ設定画面

Figure.98－ページオフセット設定画面

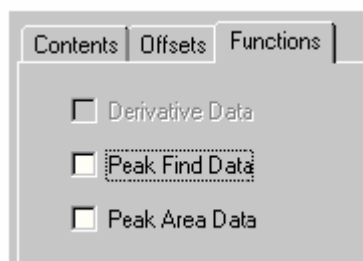



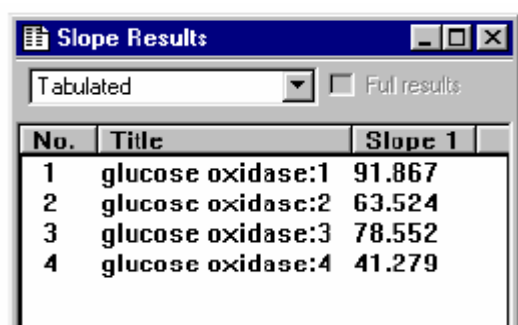
Figure.99－機能選択画面

微分データとアプリケーションの結果を含むすべてのデータは1つのグラフにオーバーレイできます。その内容は、View メニュー内の Display オプションで設定することができます。オーバーレイ機能にはスキャン／アッセイの追加・削除、個々のデータにオフセットを付加する等、追加機能と、データウィンドウにある全ての機能を備えています。パラメータオプションは、スキャン／アッセイのリストを表示するダイアログを開き、そこからデータパラメータを選択できます。

3.6.8 Slope（スロープ機能）（Reaction Kinetics）

このグループの機能は、Reaction Kinetics でスロープを計算します。これにはスロープ、インターセプト、スロープの標準偏差を計算する機能が含まれます。

メニューオプション：

Auto Region
この機能は、Kinetics Assay で自動的にスロープと結果を計算します。まずスロープの開始と終了の時間を求め、直線回帰法を用いてこれら 2 点間の変曲点を計算します。これは選択したアッセイ毎に実行します。

Define Region
この機能は、2 点間の直線回帰スロープを計算します。
2 つの点はマウスを用いて、目的の領域を選択したり、キーボードから値を入力しても定義できます。

Display Results
この機能ではスロープ結果（Slope、Result、Quality）を複数アッセイの場合は表で、スロープ一種の場合はそれのみを表示します。Full results では変曲点、開始終了時間を含むすべての結果を詳しく表示します。

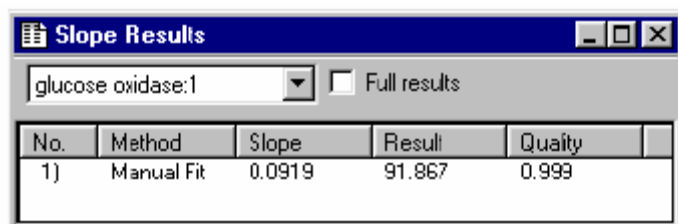



Figure.100－スロープ結果表示例

Figure.101－結果選択表示画面

注意：手動でスロープを描く場合にはまず領域を定義して枢軸点を求め、Mouse Palette から Move を選び、2つの線が交差する点にカーソルを当てドラッグしてもう一方の点を任意の位置まで移動します。

3.6.9 Slope（スロープ機能）（Quantification）

このグループの機能は Quantification アプリケーションでスロープを計算します。曲線調整に関する詳細は付録に記してあります。

メニューオプション：

Spline

標準曲線上のすべてのデータポイントに最も適合する曲線を計算します。3 点以上のデータポイントが必要です。酵素免疫解析など、S 状曲線の実験結果に利用できます。

Linear Regression（直線回帰）

標準曲線上のデータポイントに最も適合する直線を最小 2 乗法（直線回帰）により計算します。

Linear Interpolation（直線補入）

標準曲線上の連続したデータポイントを一群の直線で結合します。グロブリン型分析など、双曲線の実験結果に利用できます。

Manual

マウスを動かして、手動で直線を引くことができます。

Force Zero
データポイントとして原点を含みます。Spline および Interpolation では曲線が原点を通過しますが、最小 2 乗法で点として認識されている Linear Regression では必ずしも通過するわけではありません。

4. WAVESCAN（波長スキャン）

4.1 はじめに

Wavelength Scanning アプリケーションは、分光光度計の操作パラメータの範囲内で吸光度または透過率モードで単サンプルもしくは複数のサンプルの波長スキャンに使用できます。スムージング(smoothing)、および 1 次、2 次、4 次微分を含む、幅広いポストランデータ処理、さらにスペクトルのオーバーレイ(overlay)、加減乗除、定数をかける（または定数を加える）ことができます。スキャンデータ上の 2 点の吸光度比を計算することもできます。ピーク領域を決定し、オフセットスペクトルをオーバーレイすることもできます。繰り返しスキャンができるので、簡単なカイネティクスの解析ができます。スペクトルは市販の Multi Component Analysis ソフトウエアに出力するために適したフォーマット（ JCAMP* ）で保存することができます。

* JCAMP はスペクトルの共通化を目的とした、システムに依存せず幅広く利用できるフォーマットで、世界中の多くの分析アプリケーションが JCAMP へのエクスポートに対応しています。各メーカーの異なるデータ/異機種間の共通圧縮フォーマットとしての利用はもちろん、ASCII形式で変換すると、波数と縦軸強度をもつテキストファイルに変換し、表計算ソフト等で自由に再グラフ化が可能です。

このアプリケーションでは、Common Menu Descriptions の章(3.3)に記述されているメニューを使います。若干異なる部分は、データを直接操作する Post Run Menu オプションです。 Post Run Menu では（下図）、ビューメニューによっては限定されますが、すべての機能が利用できます。

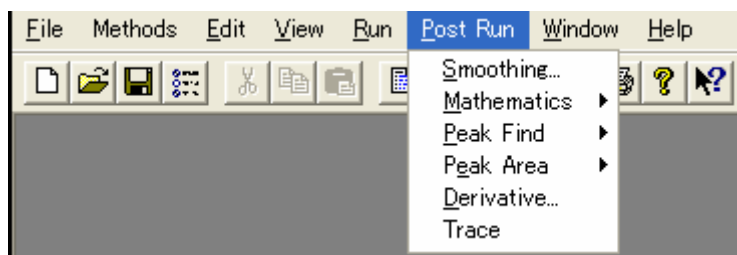



Figure.102－Post Run Menu 例

4.2 Wavescan Parameters（波長スキャンパラメータ）

測定に必要なパラメータは、下記のように 4 ページに分割されています。これらのページでは、データ収集過程について様々な要素を説明します。Parameter Sheet を開けると、状況に応じてこれらのページがいくつか、またはすべてが表示されます。New を選択すると、全 4 ページを順に見ることができます。

パラメータに連携したデータがある場合、そのパラメータは読み取り専用で、変更することはできません。同様に、Parameter で lock 機能を使用すると、設定したメソッドを起動、表示、実行できますが、パラメータを変更することはできません。

4.2.1 Parameters Page（パラメータページ）

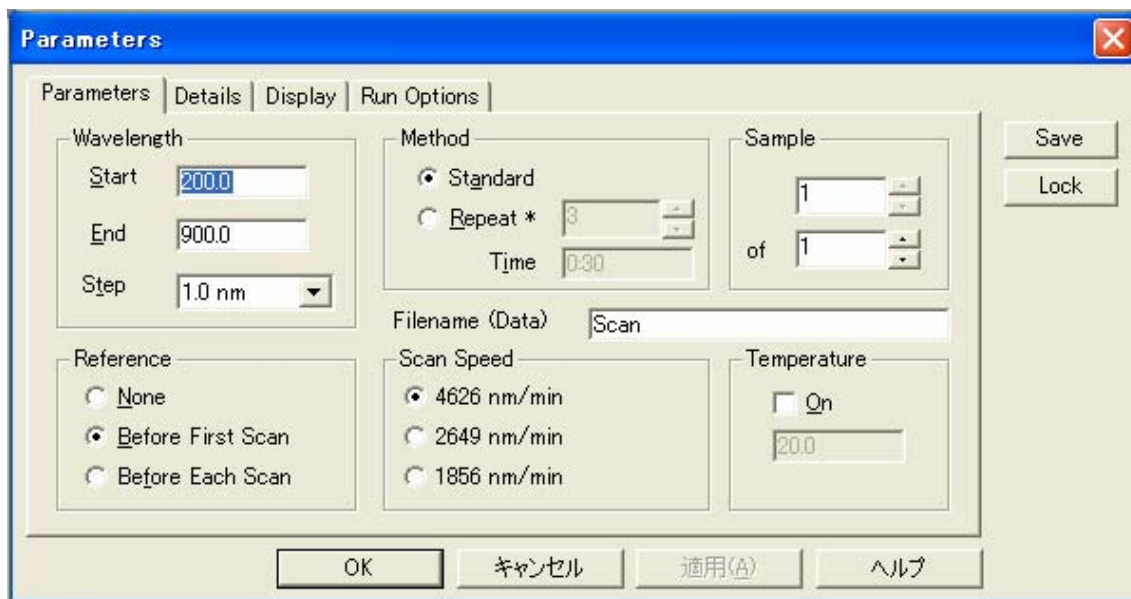



Figure.103－パラメータ設定画面

このページでは、スキャンパラメータを設定します。ここでは共通（Common） と 個別（Individual ）スキャンパラメータの 2 つのセクションに分けられています。共通スキャンパラメータは、全体のために一度設定します。各スキャンごとには個別スキャンパラメータを設定できます。

共通パラメータ:

Sample　測定するサンプル数を設定します。Sample n of N はスキャンを行う全サンプル(N)中の N　　番目のサンプルであることを示します。

Reference　　リファレンスの測定法を設定します。リファレンスをとらない(None)、一連のスキャン前に一度リファレンスをとる(Before First Scan)、リピート設定時各サンプルのスキャン前にリファレンスをとる(Before Each Scan)の設定が行えます。

Filename(Data)　このオプションは、データに関する未使用のファイル名を作成します。

Method　このオプションでは Standard（スタンダード）か Repeat（リピート）かを設定します。Repeat の場合はリピート（繰り返し測定の）回数とリピートスキャン間の間隔を設定します。

Temperature　　ペルティエ装置の使用／不使用の選択と作動温度の設定をします。

個別パラメータ:

Sample n of N　　各スキャン用に個別にスキャンパラメータをセットできます。Details ページ*と合わせて使用してください。

Start Wavelength　スキャンの開始波長を設定します。範囲は 190nm～です。

End Wavelength　スキャンの終了波長を設定します。範囲は ～1100nm です。

Step　　デ－タポイントの間隔を決定します。（0.1nm、0.2nm、0.5nm、1.0nm から選択）。これは分光光度計の機種により異なります。

Scan Speed　　　スキャン速度を決定します。データポイント間の間隔ステップにより異なります。データポイント間の間隔ステップは接続された分光光度計の機種により異なります。下記の数値は Ultrospec 4000 使用時の表示でスキャン速度 6200nm／分スペクトル時より詳しく分析するためにそれよりも低い速度を使います。

Step	Scan speed (nm/minute)
1.0 nm	6200 / 3500 / 2500
0.5 nm	3500 / 2200 / 1450
0.2 nm	3100 / 1550 / 700
0.1 nm	1550 / 880 / 450

*一度パラメータを設定した後、右上側のサンプル番号を変更することによって、個別スキャンパラメータにアクセスできます。個別スキャンパラメータを変更して個々のスキャンをカスタマイズできます。

4.2.2 Details Page（詳細ページ）

Parameters

Parameters | Details | Display | Run Options

Title

Operator

Comments

Save

Lock

Enabled　Update all samples　Sample 1

Filename　Scan-1 [21-12-03 15-48]　2003/12/21

OK　キャンセル　適用(A)　ヘルプ

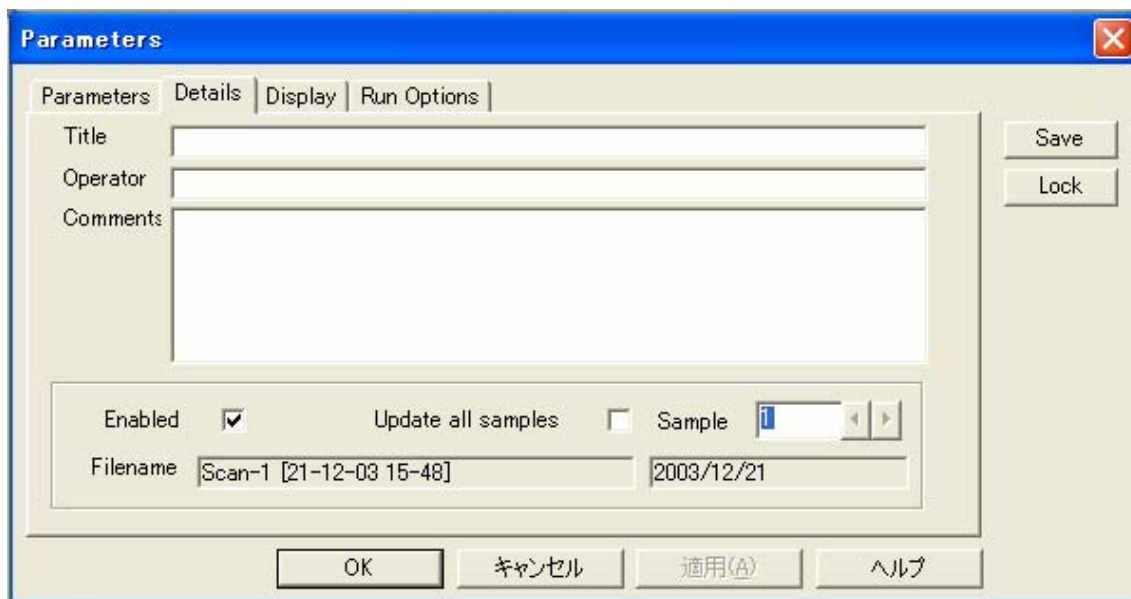



Figure.104－詳細設定画面

詳細ページでは、ユーザーパラメータを設定します。

Title　グラフに表示するタイトル

Operator オペレータ名

Comments　適用する備考

Filename　データのファイル名。これは自動的に作成されます。

Date　サンプルを測定した時刻と日付。

Sample　個別サンプルパラメータが見られます。

Update all Scan　全サンプルに共通の詳細が設定できます。

メソッドを実行すると、データと結果に対するファイル名が設定できます。これは、パラメータページで設定したファイル名に測定した日時が付加されたものです。一度パラメータを設定した後、右下のサンプル番号を変更することにより、個別スキャンパラメータにアクセスでき、変更して個々のスキャンをカスタマイズできます。

4.2.3 Display Page（表示ページ）

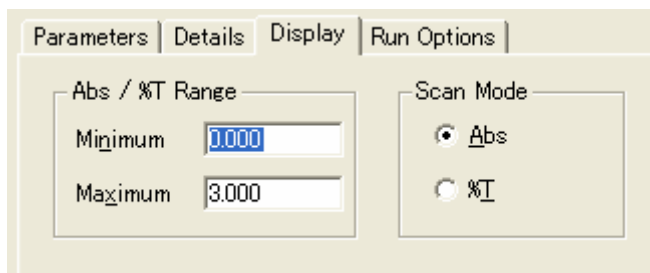



Figure.105－表示内容設定画面

この表示ページでは、スキャン中にどのようにスキャンデータを表示するかを設定します。

Minimum Abs.　　ランビューのための初期の最小吸光度を設定します。範囲は 0.0 ー3.0 です。

Maximum Abs.　　ランビューのための初期の最大吸光度を設定します。範囲は 0.0 ー3.0 です。

Abs / %T mode　　スキャン中の表示モードを設定します。

4.2.4 Run Options Page（ランオプションページ）

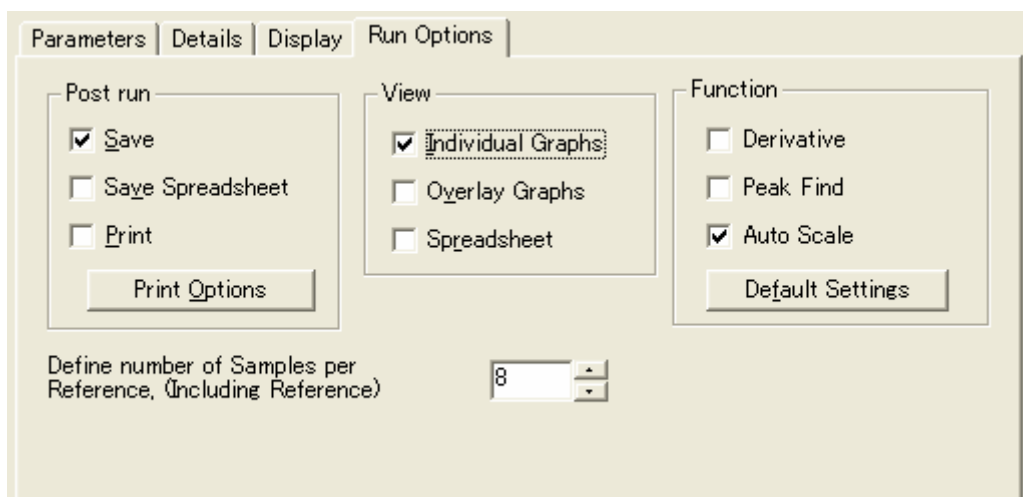



Figure.106－ランオプション設定画面

このページは測定が完了した後、自動的に実行する操作を設定します。

以下のオプションがあります。

Post Run

Save　　測定終了後、データを自動的に保存します。

Save Spreadsheet　データをスプレッドシート形式で保存します。

Print　　データを Print オプションによって設定した形式でプリントします。

View

Individual Graphs　スキャン測定毎に個々のグラフが作成されます。

Overlay graphs　　集められたすべてのスキャンデータを重ねて表示します。

Spreadsheet　　　集められたすべてのデータを、一連のスプレッドシートビューに表示します。

Functions

Derivatives　　　各スキャンのデリバティブビューを自動的に 作成します。

Peak Find　　　　デフォルト設定を使って、ピーク検索アルゴリズムが、各スキャンに適用されます。

Autoscale　　　　作成されたビューを自動的にサイズ調節して適切な軸を使ってスキャンを表示します。

Defaults Settings　Function 内のデフォルト値を設定するために使用します。

4.3 Wavescan Display Options（表示オプション）

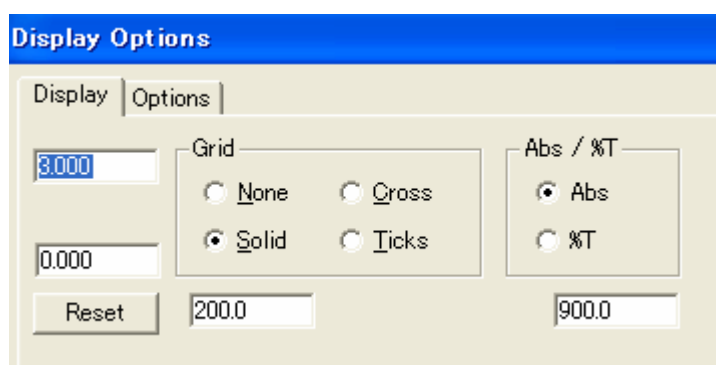



Figure.107－表示設定画面

Wavescan アプリケーションの View>Display の表示オプションではグラフ軸の設定およびグラフグリッド線の表示を選択します。さらにグラフ表示オプションを吸光度(Abs)か透過率(%T)か選ぶこともできます。これらの操作では、データはそのままで、表示のみ変更されます。

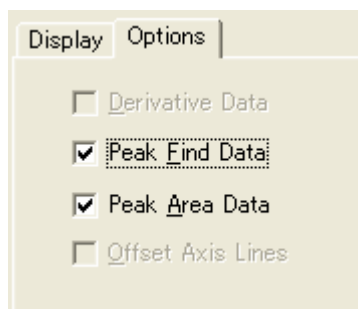



Figure.108－表示画面オプション設定画面

アプリケーションに特有で、ON／OFF 選択ができるオプションは、Peak Find、および Peak Area です。

Peak Find を選択すると、Peak をどの程度敏感に認識するかを設定することが可能です。また、各 Peak に番号をつけることができます。

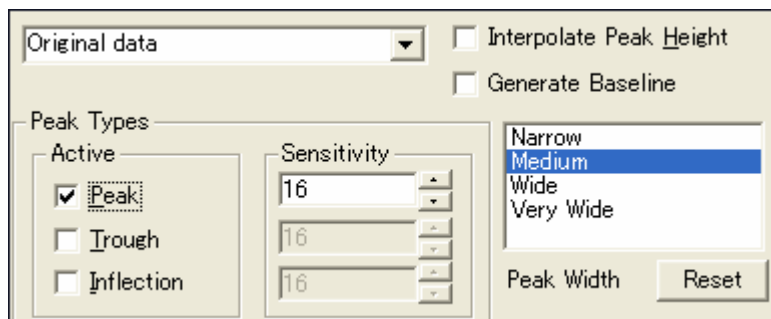



Figure.109－Peak Find 詳細設定画面

各 Peak の数値データを出力できます。

No.	Peak Type	Position	Height
1)	Peak	333.2	0.680
2)	Peak	345.2	0.537
3)	Peak	360.7	1.576
4)	Peak	385.3	0.462
5)	Peak	416.2	1.804
6)	Peak	450.8	2.500
7)	Peak	473.2	0.699
8)	Peak	484.8	1.333
9)	Peak	536.5	2.610
10)	Peak	640.4	2.316
11)	Peak	655.6	0.832

Figure.110－Peak Find 結果例

各 Peak に番号をつけてグラフを出力できます。

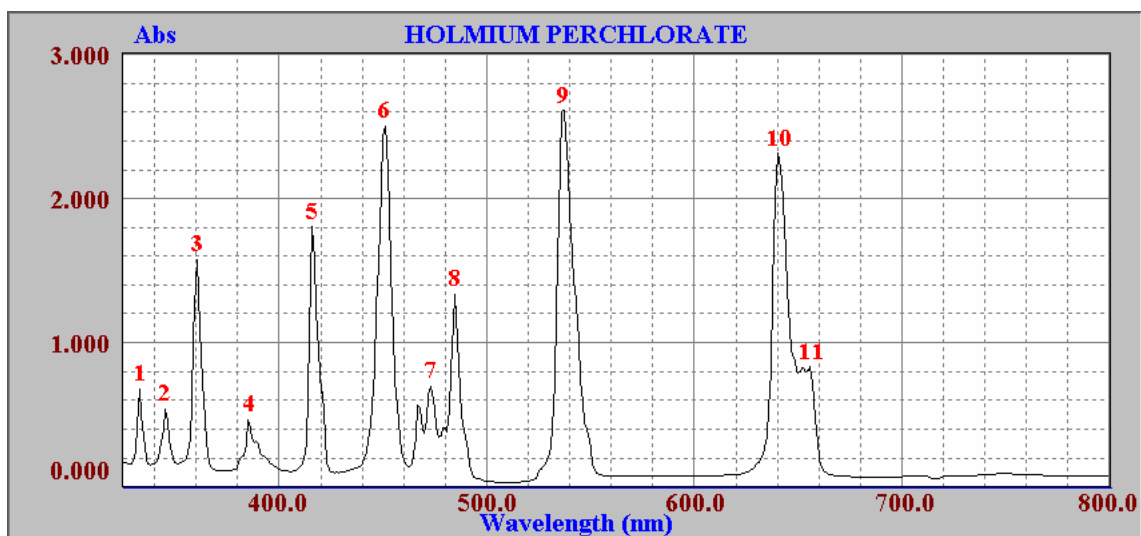



Figure.111－表示グラフ例

Peak Area を選ぶと、Baseline の設定をして、面積を算出できます。

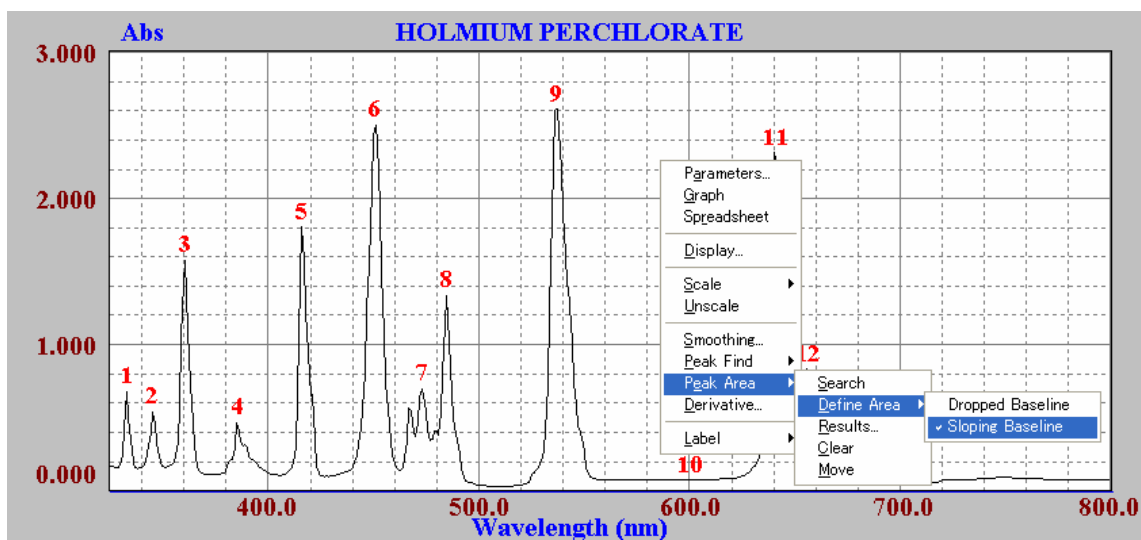



Figure.112－面積算出画面

各 Peak のデータ出力が可能です。

No.	Position	Height	Area	Start	End
1)	333.2	0.680	0.377	332.0	338.0
2)	345.2	0.537	1.271	341.0	350.0
3)	360.7	1.576	6.149	355.0	367.0
4)	385.3	0.462	0.576	382.0	390.0
5)	416.2	1.804	8.448	410.0	424.0
6)	450.8	2.500	17.10	442.0	460.0
7)	473.2	0.699	2.847	463.0	477.0
8)	484.8	1.333	4.258	480.0	492.0
9)	536.5	2.610	21.15	530.0	551.0
10)	640.4	2.316	12.24	633.0	649.0
11)	655.6	0.832	0.855	652.0	662.0

Figure.113－測定結果表示例

Peak の面積に色をつけて出力できます。色は、設定ができます。

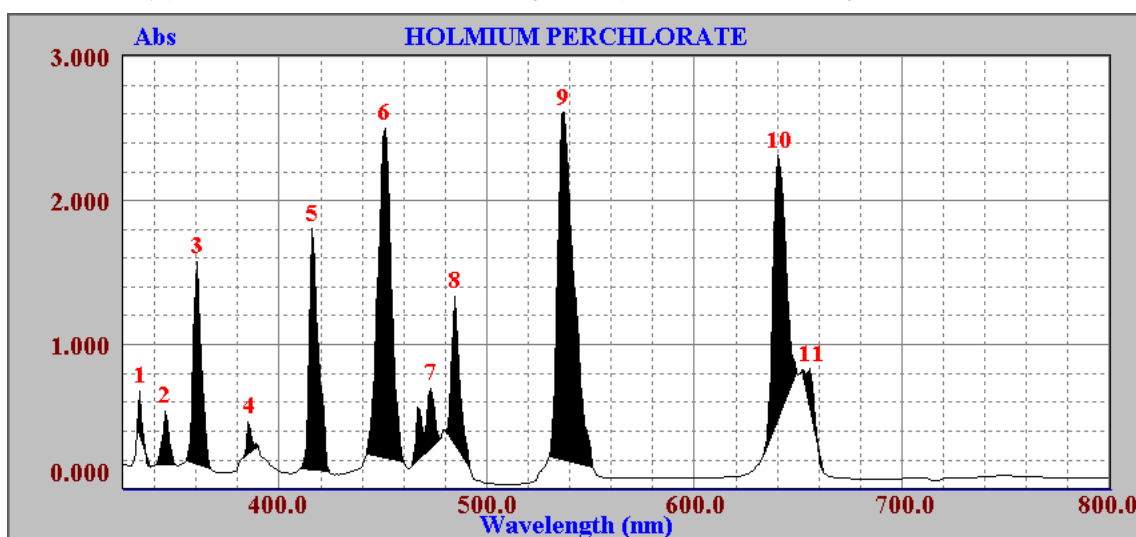



Figure.114－表示グラフ加工例

4.4 Wavescan Data（波長スキャンデータ）

データは吸光度測定値と波長から構成され、多数のデータ配列で保存されます。実測データをスプレッドシートビューで表示編集することはできますが、通常は、データビューに表示されます。データの範囲の限定は無く、浮動小数点形式になっています。データは小数点第 3 位まで、あるいは五文字表示のいずれかを選択できます。グラフ

は波長に対して Abs あるいは%T をプロットします。

4.5 Wavescan Run（波長測定）

選択された Method／Data に保存されているパラメータを使って、スキャンを実行します。既存のデータファイルである場合は、メソッドを残してデータが削除されます。前述どおり、メソッドはパラメータダイアログボックスに表示され変更が可能になります。これらのパラメータは、新規メソッドとして保存できます。

これで保存されたメソッドは実行できます。Methods は、2 つの測定モードのいずれかで作動します。

4.5.1 Standard Mode（スタンダードモード）

まずサンプルをロードします。この場合は通常 1 つのリファレンスといくつかのサンプルを順にセルチェンジャーに置いていきます。

必要に応じてリファレンスをスキャンします。これはグラフには表示されませんが、ステータスディスプレイに表示されます。そしてスキャンはひとつずつ全てが完了するまで、実行されます。リファレンスをサンプル測定の間に再び測定することもできます。

4.5.2 Repeat Mode（リピードモード）

まずサンプルをロードします。通常この場合はセルチェンジャーにリファレンスとサンプルを 1 つずつ置きます。

必要に応じて、リファレンスをスキャンします。これはグラフには表示されませんが、ステータスディスプレイに表示されます。スキャンはひとつずつ全てが完了するまで、各測定の間に時間をおいて実行されます。

4.5.3 Use with Sipper（シッパーを用いた測定）

シッパーを使用する場合、リファレンスおよびサンプルはそれぞれ 1 つずつロードします。アプリケーションではダイアログボックスが表示されるので、シッパーボタンを押し、サンプル／リファレンスをロードします。洗浄液をロードするオプションは、ブランク溶液をロードし、次のサンプルに備えます。サンプル／リファレンス／洗浄液は新しいサンプルをロードする前に戻す必要があります。

4.6 Wavescan Post Run Options（ポストランオプション）

スキャン終了後、ポストランオプションが使用できます。このオプションはプリントと保存

の前に、必要な機能を実行し、ビューを作成します。

Post Run オプションには Smoothing、Mathematics、Peak Find、Peak Area、Derivatives があり、本マニュアルの第 3 章にて詳しく説明しています。

5. Reaction Kinetics（酵素カイネティクス）

5.1 はじめに

Reaction Kinetics は、吸光度の経時変化を測定することにより、酵素反応速度(酵素カイネティクス)を算出するアプリケーションです。1サンプルずつもしくは複数サンプルを並行して測定することができます。エステラーゼのようにゆっくり作用する酵素もしくは、ペルオキシダーゼや LDH のように非常に早く作用する酵素も、モニターできます。複数の波長を同時に測定することもできます。

マルチポジションセルチェンジャーを用いて、室温または温度制御下において最大 8 つのサンプルを並行して解析できます。反応速度を算出するために、サンプルデータの最少二乗分析または、自動直線検索を行うことができます。結果の解析するために、複数の結果の加減乗除、比較のためのオーバーレイ、反応速度の一次関数を得ることもできます。酵素活性は、反応曲線のスロープを変換するために適当なファクターと単位を入力して、自動的に計算できます。Lineweaver Burke、Hanes Woolf、Eadie Hofstee 計算式を使って、Vmax、Km、Kcat そして Hill 係数が求められます。データはその他の解析ソフトで使用するためにスプレッドシートで出力することもできます。

View 内にある Michaelis Menten Plot は測定結果についてスロープおよび濃度データを表示させることができます。

5.2 Reaction Kinetics Parameters（ 酵素カイネティクスパラメータ）

5.2.1　New（新規）

測定に必要な設定項目は、Parameters、Details、Display、Run Options の 4 ページに分割されています。New を選択すると、4 ページすべてが表示されます。Parameters に連携したデータがある場合、その項目はグレーに反転し読み取り専用となり、変更することはできません。また、lock 機能を使用すると、設定したメソッドを起動、表示、実行できますが、内容の変更をすることはできません。設定完了後は Save を押すことにより、User Method として保存ができ、Method ですばやく呼び出せるようになります。

5.2.1.1 Parameters Page（パラメータページ）

このページでは、アッセイパラメータの設定をします。

Figure. 115 – パラメータ設定画面

①Method

—Serial Mode

1 サンプルずつアッセイが測定されます。測定時間が短い場合や lag phase がない（直ちに反応が開始する）場合に通常使います。マルチポジションセルチェンジャーを使用しているときは、常に同じ位置で測定します。アッセイ開始前にリ

ファレンス測定をすることができます。アッセイは設定間隔で設定時間行います。

サンプル添加のために(マルチポイントカイネティクス)アッセイは必要に応じて任意で停止、再開することができます。この一時停止は算出されたスロープ数に加算されます。

No. of Assays	測定サンプル数を設定します。
Wavelength	アッセイ時の波長を設定します。

なお、シッパーを使用する場合は、このシリアルモードしか使用できません。

—Parallel Mode

複数サンプルを並行して測定します。反応速度もしくは速度の傾きが一定の場合、使いやすいモードです。基質の添加、混合の時間が厳密でなくてもよい場合お勧めします。各アッセイの開始前にリファレンス測定することができます。このモードでは、マルチポイントカイネティクスを行うことはできません。

No. of Assays	測定サンプル数を設定します。
Wavelength	アッセイ時の波長を設定します。

—Synchronised

複数サンプルを並行、同調して測定します。シンクロ時間を設定することにより、測定を同調させることができます。各アッセイをアッセイ時間が長い場合、特に lag phase があるパラレルアッセイに使用します。各々の吸光度測定の間隔時間は Parallel Mode での測定より長くなります。

No. of Assays	測定サンプル数を設定します。
Wavelength	アッセイ時の波長を設定します。

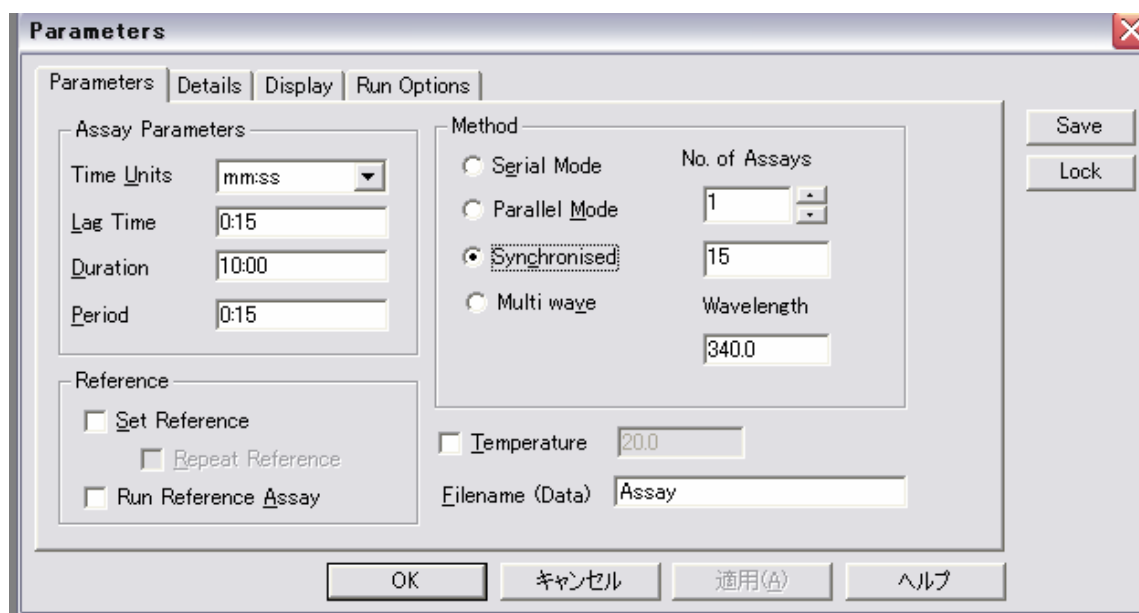



Figure.116ーシンクロ設定画面

—Multi wave

サンプルひとつにつき、複数の波長における測定を同時にできます。各々の吸光度測定の間隔時間はそのため長くなります。

No. of Wavelength　測定する波長の数を設定します。

Wavelengths　　アッセイ時の波長を設定します。No. of Wavelength で設定した数に従いひとつずつ波長を設定します。

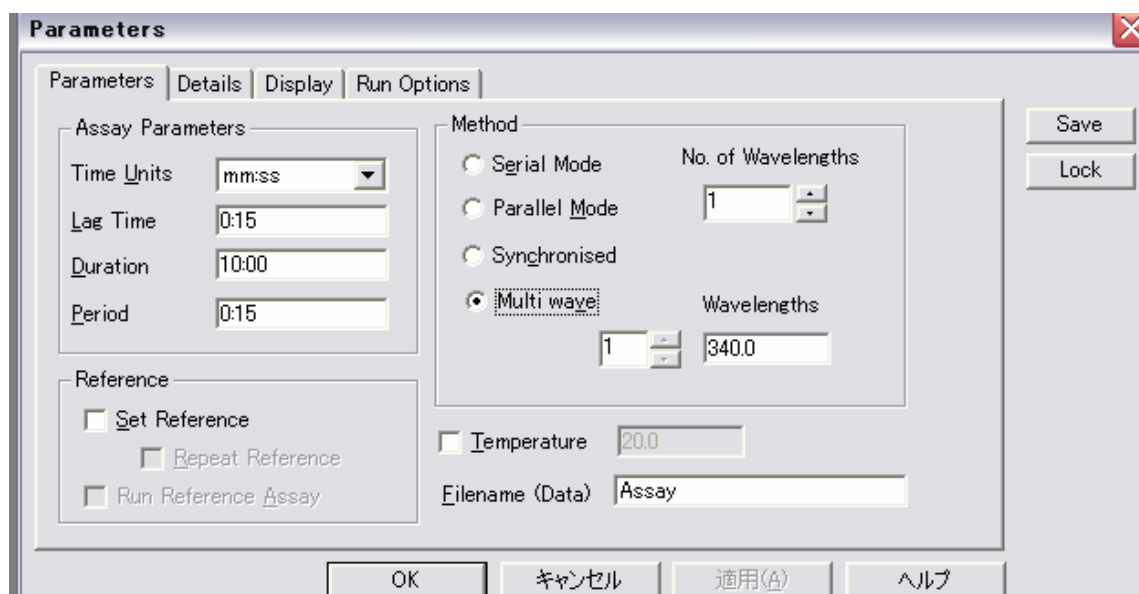



Figure.117－Multi wave 設定画面

②Assay Parameters

Time Units　時間単位を設定します。

Lag Time　アッセイ開始前の間隔または時間を示します。Synchronised が設定されている場合は、同時進行時間×サンプル数より大きくなるはずです。

Duration　アッセイにかかる時間を示します。範囲は時間単位により異なります。

Period　データをとる間隔です。Synchronised が設定されている場合は、この間隔時間は同時進行時間×サンプル数より大きくなるはずです。最小間隔は全ての波長を読み取るための時間を考慮に入れます（初期設定は 15 秒）

③Reference

Set Reference　リファレンスを適用するかを設定します。Serial モードの Repeat Reference では各アッセイ前にリファレンスが測定されます。

Run Reference　Parallel モード、Synchronised モードで、リアルタイムでリファレンス測定値をサンプル測定値から差し引くことができます。

④その他

Temparature　ペルティエ装置の使用／不使用の選択と作動温度の設定をします。

Filename(Data)　保存するファイル名を入力します。

5.2.1.2 Details Page（詳細ページ）

このページではユーザーパラメータを設定します。この項目は初期設定のままで、特に問題ありません。必要に応じて入力・設定してください。

Parameters の Method で設定した No. of Assays もしくは No. of Wavelength の数に応じて右下の Assays の数を変更することにより、個々の項目をアッセイごとに別々に設定することができます。Update all assays をチェックすると、すべて共通の設定ができます。

Figure.118－詳細設定画面

Title　　　グラフに表示するタイトル

Operator　　オペレータ名

Comments　コメント

Factor　　　算出したスロープに適用するファクター

Concentration　　　基質濃度をあらかじめ入力しておくと、測定データとともに保存され、ミカエリス-メンテン式に適用します（値は 0.001ー10,000）。1 アッセイもしくは 1 波長につき、1 サンプルを設定できます。

Units　　　濃度の単位を設定します。

Assay No.　Parameters で設定した Assay No.の数に従い、個々のアッセイについて Details の設定をします。

Filename　　Parameters で設定したファイル名。1 アッセイごとにサンプルを測定した時刻と日付がついた名前が自動的に作成されます。

Update all assays　　Parameters で設定した Assay No.にかかわらず、共通項目として Details の設定ができます。

5.2.1.3 Display Page（表示ページ）

このページでは、測定中にどのようにアッセイ状況を表示するかを設定します。この項目は初期設定のままで、特に問題ありません。必要に応じて入力・設定してください。

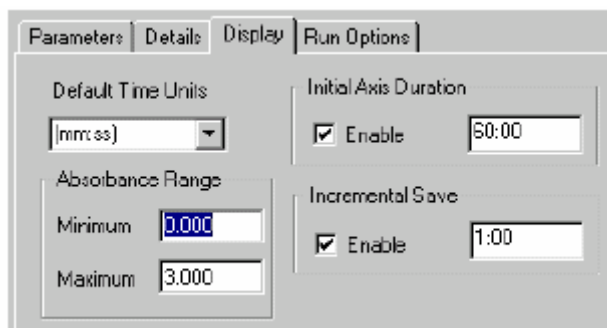



Figure. 119－表示画面設定画面

Default time units　時間単位を設定します。

　　Minimum Abs.　　　結果の初期表示の最小吸光度を設定します。範囲は 0.0～3.0 です。

　　Maximum Abs.　　　結果の初期表示の最大吸光度を設定します。範囲は 0.0～3.0 です

5.2.1.4 Run Options Page（ランオプションページ）

このページは測定が完了した後、自動的に実行する操作を設定します。この項目は初期設定のままで、特に問題ありません。必要に応じて入力・設定してください。

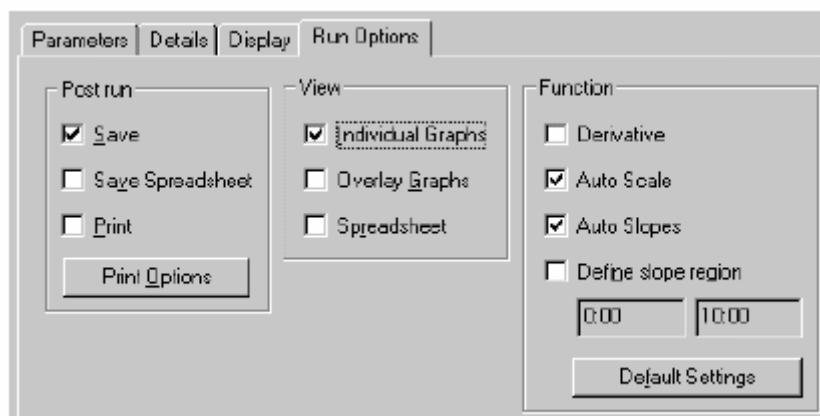



Figure. 120－ランオプション設定画面

以下のオプションがあります。

Post Run

Save　　　測定終了後、データを自動的に保存します。

Save Spreadsheet　　データをスプレッドシート形式で保存します。

Print　　　データを Print Option によって設定された形式でプリントします。

Print Option　プリントアウトするデータを選択します。インデックス、グラフ、スプレッドシート、Michalis Menten 機能のプリントアウトをそれぞれカスタマイズできます。各レポートは Add や Remove ボタンを使って任意の順序に変えることができます。Configure ボタンはプリントアウト内容をさらにカスタマイズするオプションを呼び出します。ここで設定した内容は File>Print preview で確認できます。

Figure.121－プリントオプション設定画面

View

Individual Graphs　　アッセイ毎に個々のグラフが作成されます。

Overlay graphs　　集められたすべてのアッセイ結果を重ねて表示します。

Spreadsheet 集められたすべてのデータを一連のスプレッドシートビューに表示します。

Function

Derivatives　各アッセイのデリバティブビューを自動的に作成します。

Auto Slopes 最も急な領域のスロープを自動的に算出し、表示します。

Auto Scale　作成されたビューを自動的にサイズ調節して適当な軸を使ってアッセイを表示します。

Define Slope Region　スロープを算出する領域をあらかじめアッセイ開始前に設定します。

Defaults Function 内のデフォルト値を設定するために使用します。

5.2.2 File（ファイル）

File 内のオプションについて説明します。

New　　新しい Method を作成し、そしてデフォルト値をセットします。あればデフォルトメソッドがロードされますが、なければ設定したデフォルトが使用されます。デフォルトメソッドのパラメータを変更するには"Default.**M"ファイルに新しい値を入れて上書き保存してください。プログラムは、パラメータダイアログボックスを自動的に開きます。このオプションはツールバーから利用できます。

Open　　選択したディレクトリ中のファイルを開きます。アプリケーションによって異なるデータタイプがロードされます。

Close　　このオプションは、選択しているビューを閉じます。

Save, Save As　　これらのオプションはデータをファイルに保存します。正確な操作は現行の状況により異なるので、Method File、Data File、Standard File または Spreadsheet File のいずれかに保存されます。

Export　スプレッドシートでの読解に適したフォーマットでデータを保存します。

Set-up　このオプションはアプリケーションのさまざまな設定をするためのタブ付きダイアログボックスを表示します。

Print　　このオプションはレポートを印刷します。Index、Graph、Spreadsheet、Michaelis Menten の各レポートについて印刷が可能です。内容は、 File>Set-up>Print Options ページで設定が可能です。

Print Preview　　指定したプリントフォーマットのプリントプレビューを PC 画面に表示します。Set-up>Print Options ページでフォーマットを調整できます。

Print Set-up　　プリンターを設定するために、Common Print Dialogue 機能を作動します。

Exit　　アプリケーションを終了します。

5.3 Method（メソッド）

Method 内のオプションについて説明します。すでに Parameters の設定が済み、これから測定するとき、Default で測定するとき、各メソッドを呼び出すときに使用します。

Default　ソフトウエアに予め設定されているメソッドで選択すると迅速にロードされます。

User Method　　　ユーザーによって作成されたメソッドが、速くロードできます。最大9 個のメソッドを設定できます。

Define Method　この機能では、ユーザー設定したメソッドを追加することができます。"Add"を押し、ダイアログボックスから必要なメソッドを選びます。メソッド名はテキスト上でダブルクリックして変更できます。メソッドと名前をハイライトして Remove を押すとUser Method から削除されます。

Default Settings　表示範囲の設定、表示形式の設定、一次微分の作成等の post run オプションを再設定できます。

Method（ Michaelis Menten View を使用している時に表示されます ）　　ディスプレイモードを Michaelis Menten、Lineweaver Burke、Hanes Woolf または Eadie Hofstee から 1 つ選択できます。この方法は、全ての Data Set に適用できます。

5.4. Reaction Kinetics Run（実行）

5.4.1Run（実行）

Run　　現行のメソッドを実行します。

Default　Standard スタンダードと呼ばれるメソッドをロードし、実行します。メソッドが見つからない時は、代わりにデフォルト値を使って新しいメソッドを作成し、実行します。

Method　現行のメソッドを実行します。また、必要な場合メソッドをロードして実行します。

5.4.2 Run time Menu（ランタイムメニュー）

実行中に表示されるメニューについて説明します。

Abort　　測定を中止します。表示されるダイアログボックスで、現行のデータを保存/破棄を選択できます。使用中のアプリケーションや接続されている分光光度計によっては、すぐに中止が実行されないこともあります。

Display Hide / Show　　　Run display ステータスボックスを表示（Show）または非表示（Hide）します。

Scale　　データに Full Scale か Auto Scale 機能を適用し、新しいスケールで再びグ

ラフを表示します。

Pause / Start　　Reaction Kinetics にのみ適用できます。マルチポイントカイネティクスが実行できるように、アッセイを一時停止／再始動します。

Next　　Reaction Kinetics のシリアルカイネティクスモードにのみ適用できます。現行のアッセイを終了しリストの次アッセイを開始します。

5.4.3 Run View（ランビュー）

このビューは測定中にのみ表示される特別なビューで、集められたデータを表示します。このビューは、測定中、アプリケーションウィンドウ大に拡大されます。

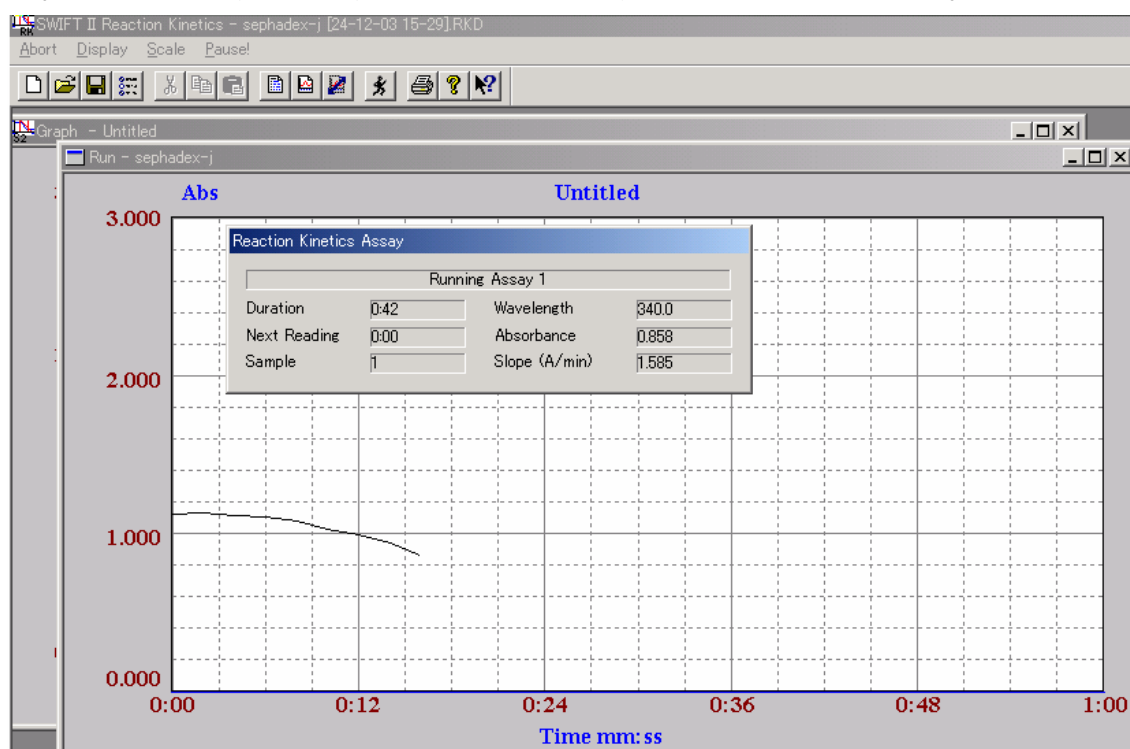



Figure.122－Run 画面例

ビューには、現在の分光光度計の状態を表示するステータスバーがあり、集められた結果を表示するコントロールバーをオプションで表示することもできます。

5.5 Edit（編集）

Edit 内のオプションについて説明します。表示している View により、内容が異なります。

Index View

Clear　　　データセットからデータを削除します。データに関係しているビューはいずれも閉じられます。

Merge assays 別グループ（別実験）のデータを 1 つのファイルにまとめます。この作業は View 内の Overlay 機能を使用する前に行ってください。Group ダイアログボックスをクリックして Merge を起動してください。

Copy　　　クリップ・ボードに選択したアイテムをコピーします。

Paste　　　グループにクリップ・ボード内のデータアイテムをペーストします。

Cut クリップ・ボードに選択したアイテムをコピーし、グループから削除します。

Graph View

Clear データセットからデータを削除します。データに関係しているビューはいずれも閉じられます。

Copy Graph　ビットマップとしてクリップ・ボードにビューをコピーします。

Copy data　　クリップ・ボードに選択したアイテムをコピーします。

Label（Add、Edit、Move）データビューにラベルを付加、編集、または移動します。このオプションはパレットから利用できます。

Spreadsheet View

Edit　スプレッドシートビューをディスプレイ／編集モードに切り替えます。データが読み取り専用の場合、この機能は使えません。

Clear データセットからデータを削除します。データに関係しているビューはいずれも閉じられます。

Copy クリップ・ボード（内部のクリップ・ボード）に選択したアイテムをコピーします。

Michaelis Menten View

Data Points　ミカエリス・メンテンデータポイントの編集をします。データペアの付加と削除、そしてデータペア値の変更が含まれます。全てのデータセットからの全てのデータペアの呼び出しが可能です。

Copy Graph　ビットマップとしてクリップ・ボードにビューをコピーします。

Label（Add、Edit、Move）データビューにラベルを付加、編集、または移動します。このオプションはパレットから利用できます。

5.6 Reaction Kinetics Display Options（表示オプション）

5.6.1View

View 内のオプションについて説明します。表示している View により、内容が異なります。

Parameters　　　現行データのパラメータを表示します。

Graph　現行データの他の データビューを表示します。このオプションは、ツールバーから利用できます。

Results　結果を表にして表示します。

Spreadsheet　　　現行データのスプレッドシートを表示します。すでに開いている場合は、最前面に表示されます。このオプションはツールバーから利用できます。

Overlay　オーバーレイビューを表示します。現行データを自動的にロードします。別々のグループ（実験）のデータの場合はEdit>Mergeであらかじめひとつにまとめてください。

Michaelis Menten Plot　　　Michaelis Menten Plot の設定をします。詳しくは 5.8 Michaelis Menten 表示オプションの利用で説明します。

Display　Set-up ダイアログのディスプレイページを開きます。選択されたビューオプションのみ変更できます。このオプションでは、スケールの設定、Grid（グリッド）の On/Off などの設定をすることができます。これらの操作では、データはそのままで表示のみ変更されます。

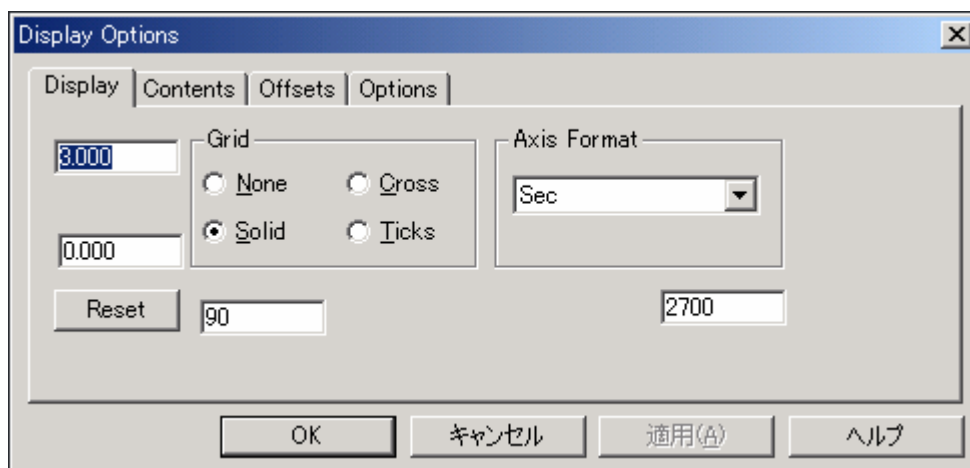



Figure. 123 – 画面表示設定画面

アプリケーションに応じて、ON／OFF 選択ができるオプションは以下のとおり

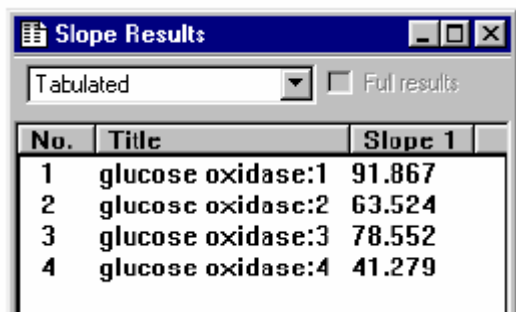
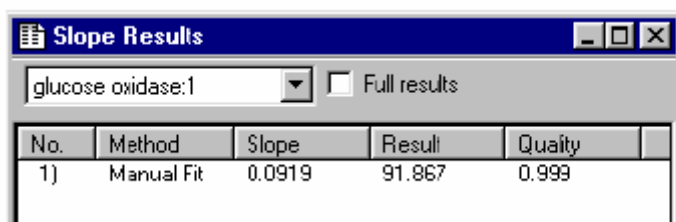
です。

Derivative　微分データ
Slope Lines 傾き
Multi Point Breaks　　多点表示
Offset Axis Lines　　軸の補正

Scale（Auto、Full、Region、Zoom）　　適切なスケーリング機能を適用します。Zoom はズームエリアをマウスで指定する必要がありますが、Auto、Full、そして Region はそのまま適用されます。
Unscale　Zoom と Scale オプションを回復します。
Toolbar　ツールバーの表示／非表示を選択します。
Status Bar　　　　ステータスバーの表示／非表示を選択します。
Mouse Palette　　マウスパレットの表示／非表示を選択します。

5.6.2Results（Michaelis Menten View）
結果を表示します。次の 3 つの形式で結果を表にします。1 つのメソッドで複数のデータセットを比較、3 つのメソッドで 1 つのデータセットを比較、現行の方法を使って 1 つのデータセットを詳細に表示。これら 3 つの方法はタブ付きダイアログボックスで表示されるため、3 つの形式間の切り換えが簡単です。

5.7 Reaction Kinetics Post Run Options（ポストランオプション）
スキャン終了後、ポストランオプションが使用できます。このオプションはプリントと保存の前に、必要な機能を実行し、ビューを作成します。Post Run オプションには Slope、Mathematics、Derivative および Trace があります。

5.7.1 Slope（スロープ機能）（Reaction Kinetics）
このグループの機能は、Reaction Kinetics でスロープを計算します。これにはスロープ、インターセプト、スロープの標準偏差を計算する機能が含まれます。
Auto Region　　　この機能は、Kinetics Assay で自動的にスロープと結果を計算します。まずスロープの開始と終了の時間を求め、直線回帰法を用いてこれら 2 点間の変曲点を計算します。これは選択したアッセイ毎に実行します。

Define Region　　この機能は、2 点間の直線回帰スロープを計算します。2 つの点はマウスを用いて、目的の領域を選択もしくは、キーボードから値を入力して定義できます。

Display Results　　この機能ではスロープ結果（Slope、Result、Quality）を複数アッセイの場合は表で、スロープ一種の場合はそれのみを表示します。Full results では変曲点、開始終了時間を含むすべての結果を詳しく表示します。

Figure.124－SlopeResult 例

Figure.125－単一データ表示例

注意：手動でスロープを描く場合にはまず領域を定義して枢軸点を求め、Mouse Palette から Move を選び、2つの線が交差する点にカーソルを当てドラッグしてもう一方の点を任意の位置まで移動します。

5.7.2 Mathematics（計算機能）

計算機能は、Assay と Point の 2 つのオプションから構成されており、アッセイデータを操作します。

Assay　　結果は他のアッセイ結果と加減乗除でき、別のアッセイ領域内に保存された新しい結果と共に記録できます。

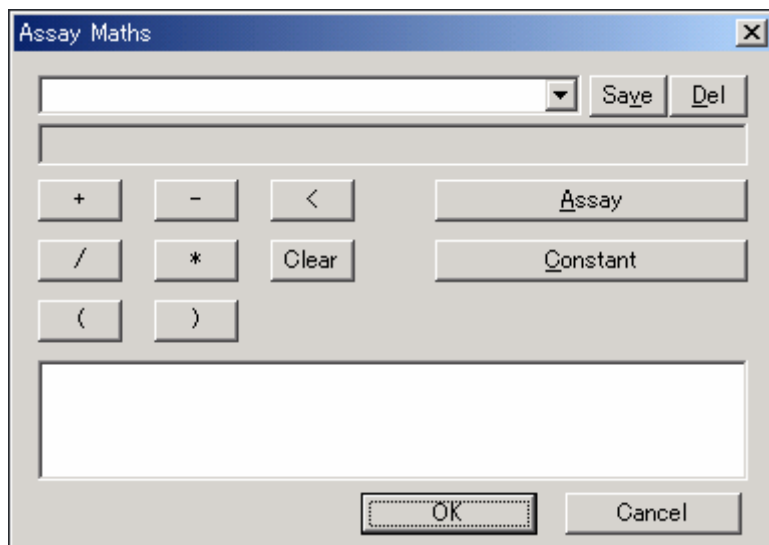



Figure.126－計算式入力画面

Assay Math 機能はアッセイ結果と定数を使って、方程式を作ることができます。操作するアッセイはすべてと同じグループ内にまとめて（Merge 機能）あらかじめ背景に立ち上げておきます。これらは Assay ボタンで選択でき、タイトル一覧はダイアログボックスに表示されます。選択されたアッセイにはこれらの情報が表示されるボックスの下部に示されます。方程式は順に特定されますので、テキストボックスをハイライトして内容を入力して保存できます。

Point　　Point Maths 機能により、定数と特定の吸光度値を使って計算できます。例えば、360nm における吸光度に 14 を掛けたことを示しています。この機能は特定のスキャンにおける吸光度比を検出するために、また特定吸光度に入力したファクターを掛け合わせて濃度を算出するために利用できます。このような計算式はテキストボックスをハイライトして内容を入力し保存できます。

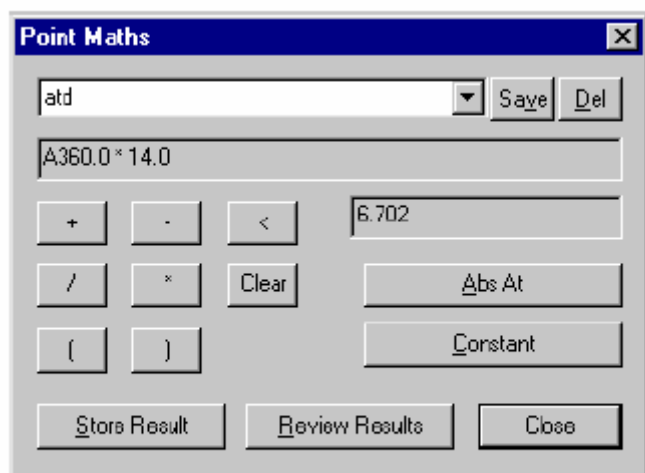



Figure 46 - Point Maths Dialog Box

Figure.127－計算式入力画面

複数の点を操作し、もとのアッセイデータとともに保存、プリントできます。各操作時にStore Result を押し、Review Result で確認してください。プリント時には Print を押すか、またはオプションを閉じて File>Print オプションを選んでください。

5.7.3 Derivative（微分機能）
微分機能は、1 次微分を実行し、データをデリバティブビューに保存します。これらの機能は微分パラメータと結果をフォーマット、表示、印刷することもできます。

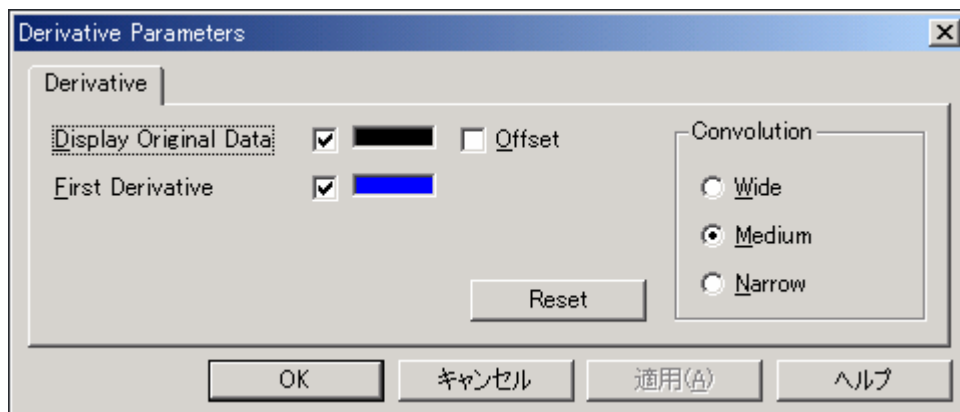



Figure.128－微分パラメータ設定画面

各アプリケーションでは微分ビューをカスタマイズできます。1 次微分の算出が可能で

す。微分グラフの両端が短く見える理由はアルゴリズムに必要なデータポイントの数によるものです。その度合はたたみ込み（合成積）と感度設定により変化します。

5.7.4 Trace
データ上でマウスをロックし、細十字線のポイントを移動してデータ値を確認できます。データ値は SWIFT アプリケーションウィンドウの左下に表示されます。

5.8 Michaelis Menten 表示オプションの利用
View ＞ Michaelis Menten Plot のウィンドウでは、一組の分析に対して Michaelis Menten のデータ処理を行った結果を表示できます。Michaelis Menten のデータ配列を作成するには、まず、適切な分析をデータファイルとして読み込み、勾配を最適化しておきます（オリジナルのパラメータを適切な因数で換算し、勾配が有意な単位になるようにします）。
Edit ＞ Data Points ＞ Add Set を選択し、ファイル名および分析名を勾配、濃度の値とともに設定します。これらは別々に選択することも、一度に選択することもできます。それぞれのファイル名に対して一連のデータ入力欄が表示され、パラメータ設定時（ Parameters ＞ Details ）に基質の濃度が入力されていなかった場合は、ここで入力できます。完了すると、値が表示されます。
OK ボタンを押すと、[S]（基質濃度）に対する V（反応速度）のプロット、すなわち Michaelis Menten プロットが表示されます。

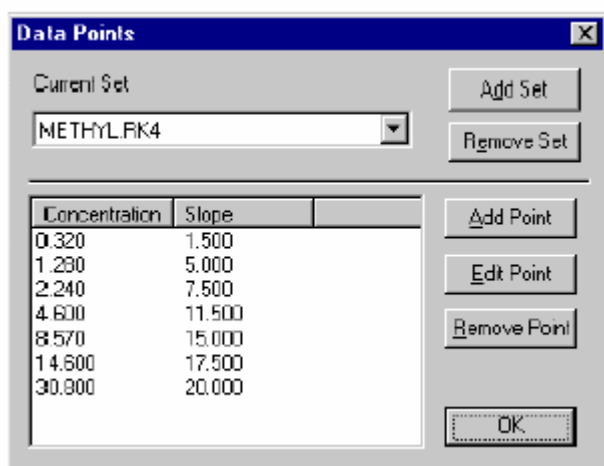



Figure.129－データ確認、操作画面

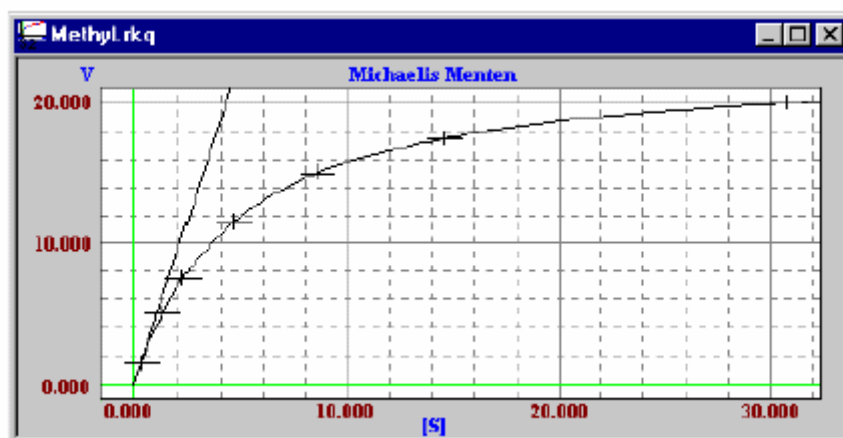



Figure.130－グラフ表示例

5.8.1 Michaelis Menten View（ミカエリス・メンテンビュー）

このビューは、測定されたアッセイデータから作成されます。

・データポイントはカイネティックス解析の濃度とスロープから成ります。

・データセットは、スロープとインターセプトを得るために分析された複数のデータポイントから成ります。

このビューは少なくともひとつあるいはそれ以上のデータセットのプロットにより構成されており、さらに結果を得るために使用されるスロープ、インターセプトも含みます。グラフは Michaelis Menten、Lineweaver Burke、Hanes Woolf、Eadie Hofstee の 4 種類から選択して表示することができます。

ビューは複数のデータセットを表示できるので、ミカエリスメンテンプロットを相互比較した（ Overlaid ）結果を表にすることができます。

File	Edit	View	Method	Window
New	Data Points	Results	Michaelis Menten	Cascade
Open...	Copy Graph	Display Grid	Eadie Hofstee	Tile
Close	Label	Display Intercepts	Lineweaver Burke	Arrange Icons
Save		Toolbar	Hanes Woolf	View A
Save As		Status Bar		View B
Export		Mouse Palette		
Setup...				
Print				
Print Preview				
Print Setup...				
File A				
File B				
Exit				

Figure.131－メニュー

5.8.2 Viewing results（結果表示）

View ＞ Results ＞ Selected を選ぶと、対象となっているメソッドについて、勾配、切片、Km、Vmax、直線性、Hill 係数が表示されます。Eo すなわち酵素の濃度の値を入力すると、Kcat（Vmax/Eo）が求められ、Kcat/Km すなわち特異定数が表示されます。これは、Eo の値を入力した後で結果欄をクリックすると表示できます。

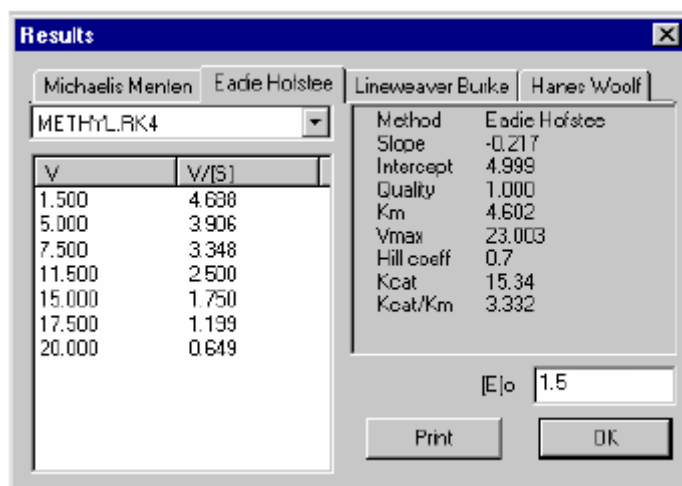



Figure.132－測定結果表示例

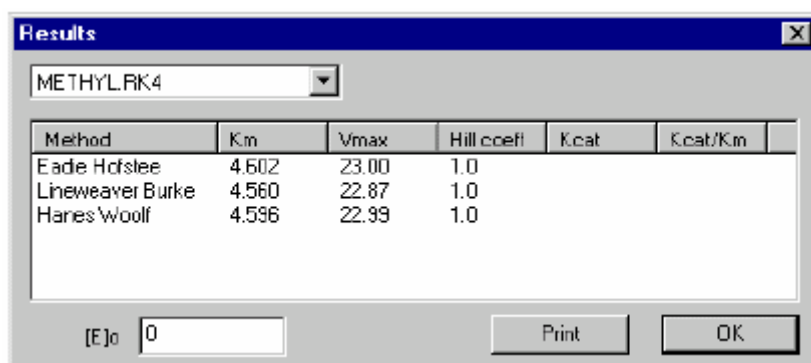



Figure. 133 - Michaelis Menten　結果- All（全体表示）

View＞Results＞All を選ぶと、Lineweaver Burke、Eadie Hofstee、Hanes Woolf の各プロット結果が表示され、比較することができます。

5.8.3 Overlaying results（オーバーレイ）

異なるレベルの酵素阻害剤を使って行った実験に対して Lineweaver Burke 分析のオーバーレイを行うと、発生している阻害のタイプについての情報が得られます。これは、現在表示されている Michaelis Menten プロットの上に、データポイントのセットを新たに入力することによって可能です。

5.9 Window（ウィンドウ）

Tile　　ディスプレイ上で見える全てのビューを並べて、メインウィンドウに全て表示します。

Cascade　全てのビューを順に重ねて表示します。

Arrange Icons　　メインウィンドウの下部に全てのアイコンを並べます。

View　　特定のビューを選択し、それを前面に置き、必要に応じて拡大します。

5.10 Help（ヘルプ）

Using Help　　　ヘルプ機能の使い方を説明します。

Index　　ヘルプ機能のインデックスを表示します。

About　　製作者の情報を表示します。

6. TIME DRIVE（タイムドライブ）

6.1 はじめに

Time Drive アプリケーションは吸光度の変化をリアルタイムにオンラインモニタリングするために使用されます。クロマトグラフィーカラム、発酵器、細胞培養液、生産プロセス（最長 100 日）などで、必要に応じていくつかの波長を同時にモニターできます。

このアプリケーションでは Common Menu Descriptions の章（3.3）に記述されているメニューを使用します。若干異なる部分は、直接データを操作する Post Run Menu オプションです（右図）。ビューメニューによって限定されますが、すべての機能が利用できます。

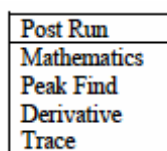



Figure.134－Post Run メニュー

6.2 Time Drive Parameters（タイムドライブパラメータ）

パラメータの設定は、4 ページに分割されています。Parameter sheet を開けると、状況に応じてこれらのページがいくつかまたはすべてが表示されます。新規作成（New）をクリックすると、設定画面が開きます。

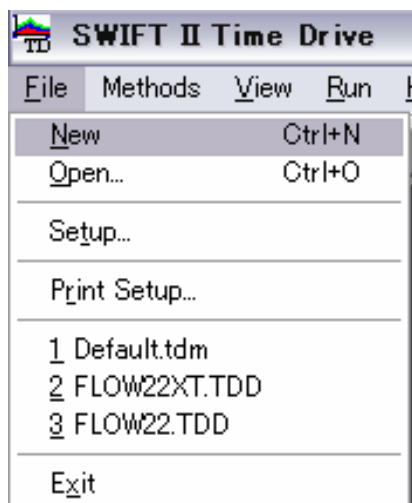



Figure.135－File 選択画面

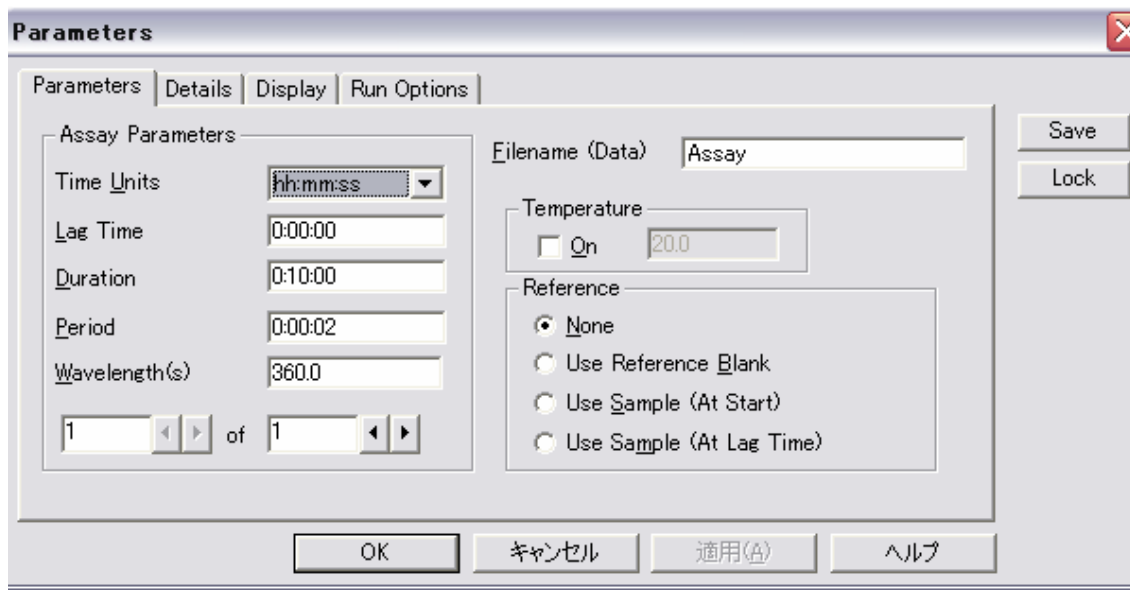



Figure.136－パラメータ入力画面

測定結果がある場合(データを Open した場合)、パラメータは確認専用で、設定内容の確認は可能ですが、変更することはできません。

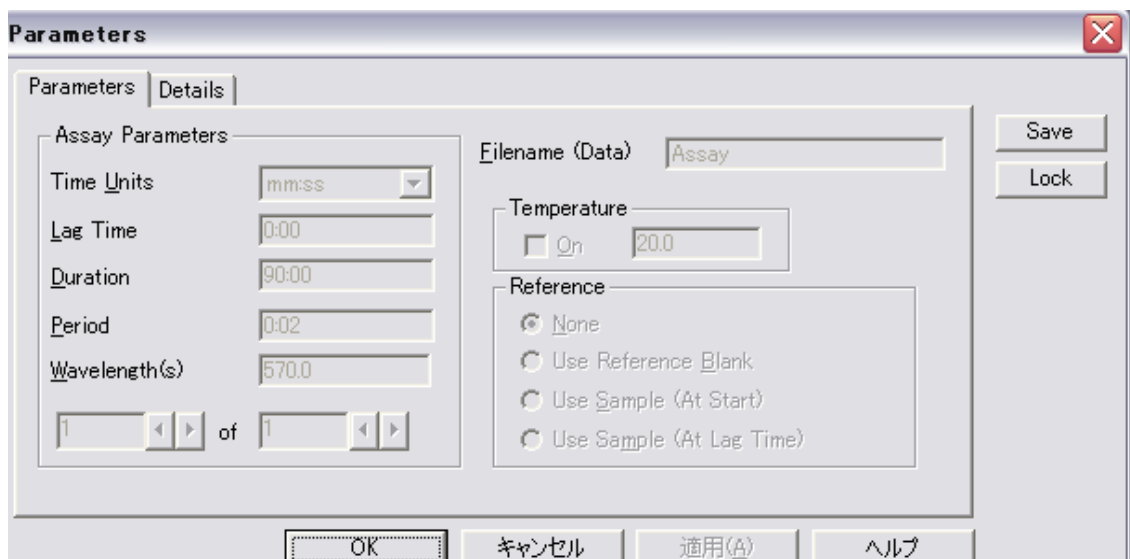



Figure.137－パラメータ確認画面

同様に、Parameter で lock 機能を使用すると、設定したメソッドを起動、表示、実行できますが、パラメータを変更することはできません。

6.2.1 Parameters Page(パラメータページ)

Figure.138ーパラメータ入力画面

このページでは、アッセイパラメータを設定します。

Time Units　　　時間単位を設定します。

Lag Time アッセイ開始前の間隔または時間を示します。

Duration アッセイの開始から終了までの時間で、範囲は時間単位により異なります。

Period　データをとる間隔です。

Wavelength(s)　　アッセイ時の波長を設定します。例えば 3 波長で行う場合、n of N の N を 3 に設定し、1、2、3 の波長をそれぞれ入力してください。

Filename(Data)　　データを保存するファイル名を作成します。

Temperature　　　ペルティエ装置の使用／不使用の選択と作動温度の設定をします。

Reference　　　リファレンス測定の適用形態を設定します。

None（測定しない）、Blank を使用して測定する、測定開始時のサンプルを使用する、およびラグタイム終了時の測定データを使用するから選択します。

6.2.2 Details Page（詳細ページ）

Figure.139－詳細入力画面

このページではユーザー情報を設定します。（必須ではありません。）

Title　グラフに表示するタイトル

Operator　オペレータ名

Comments　適用する備考

Assay　個々のパラメータを見ることができます。

Filename ファイル名。パラメータ画面で設定・入力したファイル名に時刻と日付が自動的に付加された名称が作成されます。

Enabled　チェックが入っている場合だけ、上記設定が可能になります。

Update all assays　チェックすると、全サンプルに共通の詳細が設定できます。

パラメータ設定画面で入力した Assay 数だけ、Assay の番号が表示できます。サンプル番号を変更することにより、個別情報を変更し、各アッセイをカスタマイズすることができます。Update all assays にチェックが入っている場合はすべて共通なので各アッセイの情報は変更できなくなります。

6.2.3 Display Page（表示ページ）

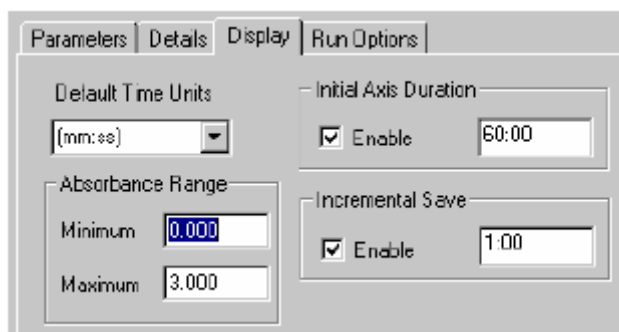



Figure.140－表示設定画面

このページは、測定中の表示方法を設定します。

Default time units　初期時間単位を設定します。

Minimum Abs.　　ランビューのための初期の最小吸光度を設定します。範囲は 0.0～3.0 です。

Maximum Abs.　　ランビューのための初期の最大吸光度を設定します。範囲は 0.0～3.0 です。

Incremental Save　自動的にデータを保存します。保存期間を設定することができます。

Initial axis duration データが蓄積されるごとに軸が拡大するように、X 軸を自動的に調節します。

6.2.4 Run Option Page（ランオプションページ）

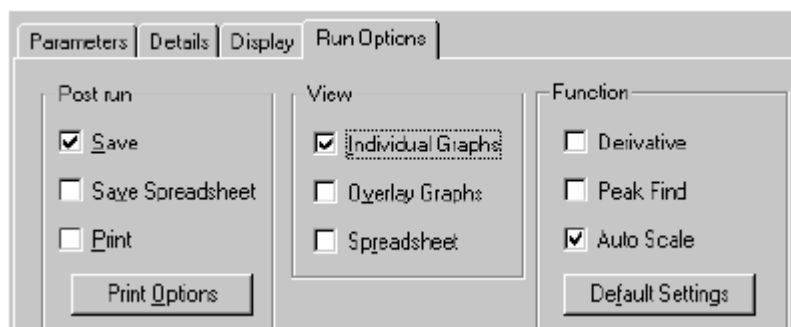



Figure.141－ランオプション設定画面

このページは測定が完了した後、自動的に実行する操作を設定します。ここで設定していなくても、必要な情報や、データは測定後の Post Run で設定・確認・印刷等行えます。

以下のオプションがあります。

Post Run

Save　　測定終了後、データを自動的に保存します。

Save Spreadsheet　データをスプレッドシート形式で保存します。

Print　　データを Print オプションによって設定された形式でプリントします。

View

Individual Graphs　アッセイ毎に個々のグラフが作成されます。

Overlay graphs　　集められたすべてのアッセイ結果を重ねて表示します。

Spreadsheet　　　集められたすべてのデータを一連のスプレッドシートビューに表示します。

Function

Derivative　　　各アッセイのデリバティブビューを自動的に作成します。

Peak Find　　　ピーク検索アルゴリズムが、初期設定パラメータを使って適用されます。

Auto Scale　　　作成されたビューを自動的にサイズ調節して適当な軸を使ってアッセイを表　　　　　示します。

Defaults　Function 内のデフォルト値を設定するために使用します。

6.3 Time Drive Display Options（測定後の表示オプション）

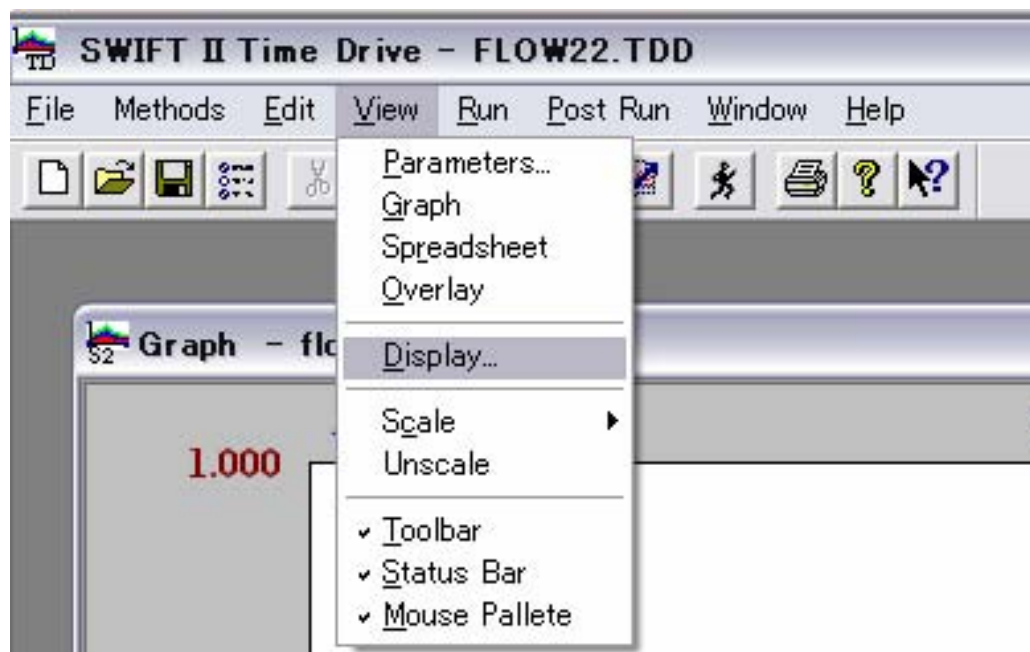



Figure.142－View 選択画面

View>Details の表示オプションではグラフ軸の設定およびグラフグリッド線の表示を選択できます。さらに時間軸形式の変更も行えます。これらの操作では、データはそのままで表示のみ変更されます。

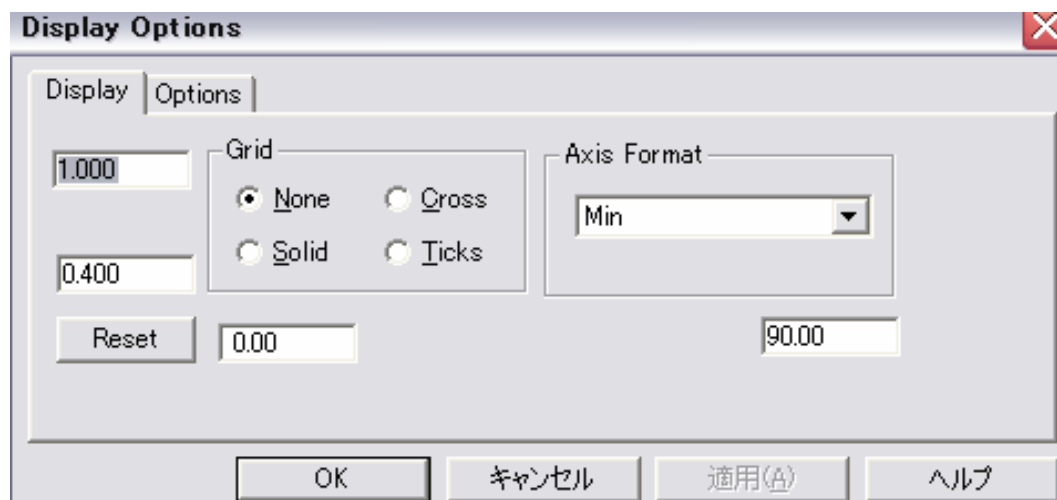



Figure.143－表示オプション設定画面

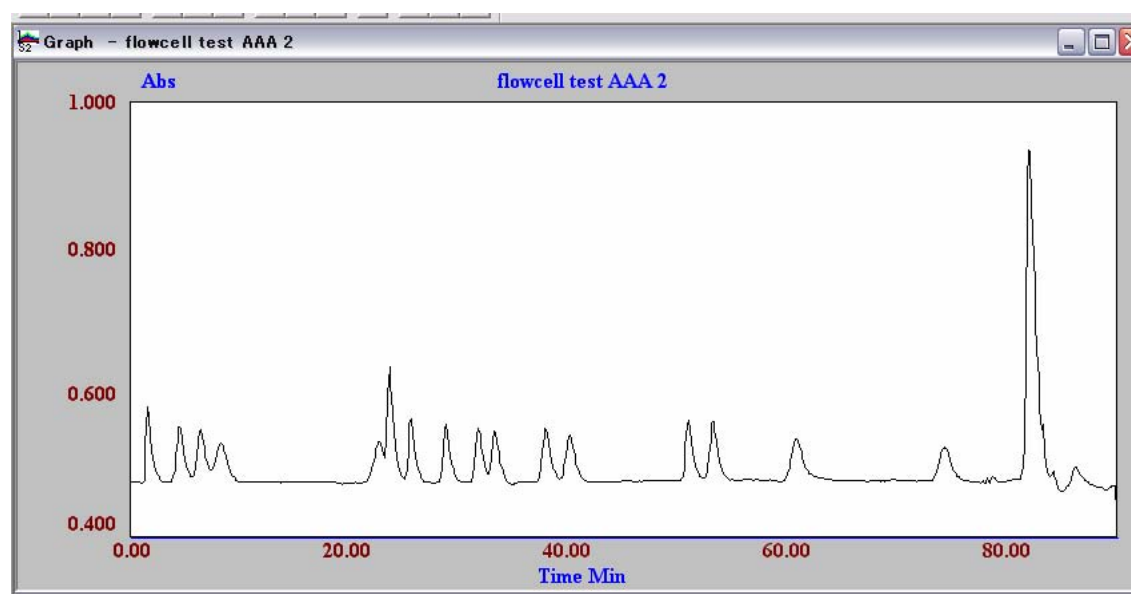



Figure.144－グラフ表示例

Grid を None から Solid に変更した場合、下図のように変更されます。

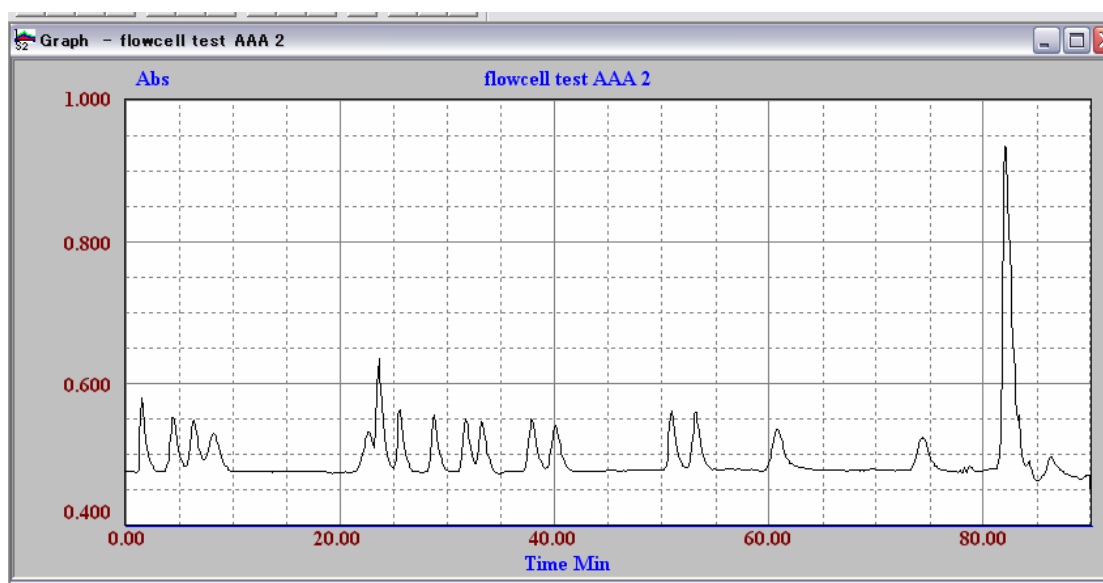



Figure.145ーグラフ操作例

さらに Option タブでは、アプリケーションに特有な、Derivative、Peak Find、Peak Area および Offset Axis Lines の選択、変更が可能です。

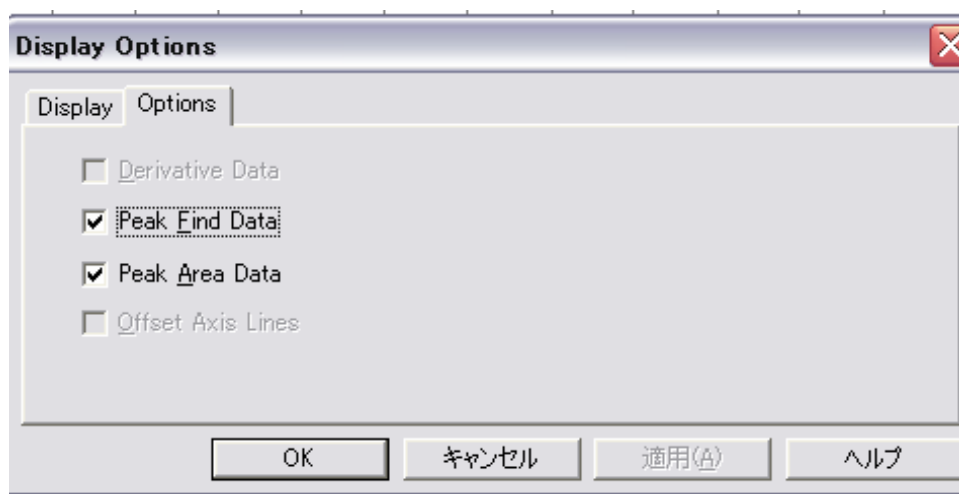



Figure.146ー表示オプション選択画面

6.4 Time Drive Data（タイムドライブデータ）

データは 吸光度測定値と時間から構成され、多数のデータ配列で保存されます。実測データをスプレッドシートビューで表示、編集できますが、通常はグラフ表示されます。

Figure.147－View 選択画面

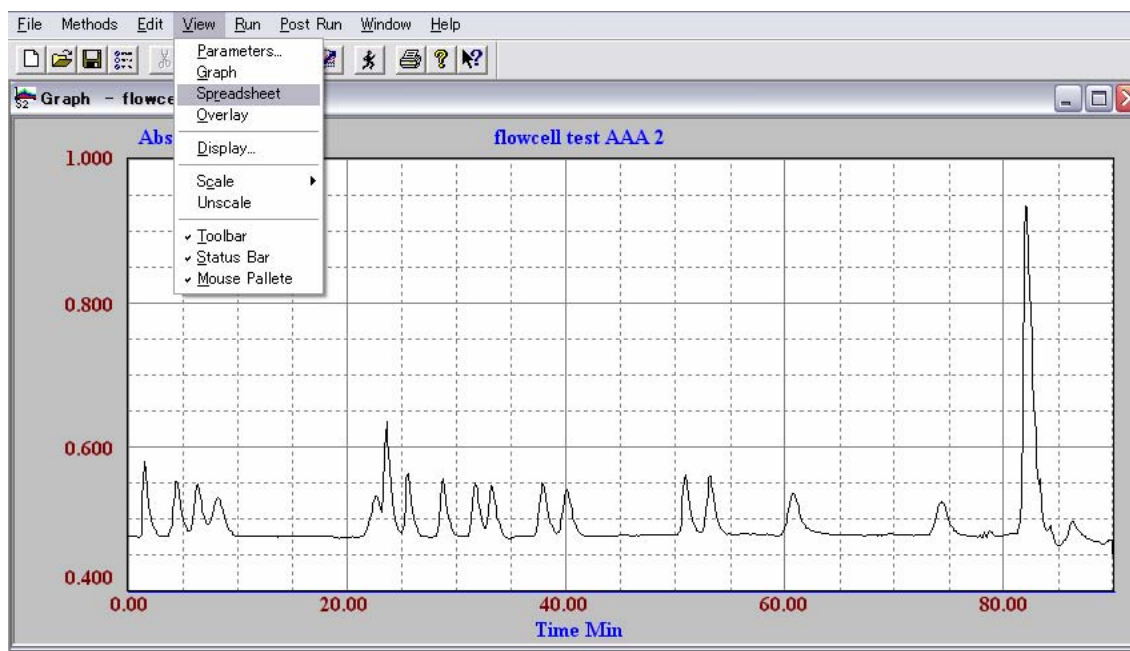
Spreadsheet - flowcell test AAA 2:1

0	0.475	20	0.475	40	0.475	60	0.474	80	0.526	100	0.552	120	0.510
1	0.475	21	0.475	41	0.475	61	0.474	81	0.535	101	0.548	121	0.508
2	0.476	22	0.475	42	0.475	62	0.474	82	0.544	102	0.545	122	0.507
3	0.476	23	0.475	43	0.475	63	0.474	83	0.552	103	0.542	123	0.505
4	0.475	24	0.475	44	0.475	64	0.474	84	0.559	104	0.539	124	0.504
5	0.475	25	0.475	45	0.475	65	0.474	85	0.566	105	0.536	125	0.503
6	0.475	26	0.475	46	0.475	66	0.474	86	0.572	106	0.533	126	0.502
7	0.475	27	0.475	47	0.475	67	0.474	87	0.577	107	0.530	127	0.501
8	0.475	28	0.475	48	0.475	68	0.474	88	0.580	108	0.529	128	0.500
9	0.475	29	0.475	49	0.475	69	0.475	89	0.582	109	0.526	129	0.499
10	0.475	30	0.475	50	0.475	70	0.476	90	0.582	110	0.524	130	0.498
11	0.475	31	0.475	51	0.475	71	0.477	91	0.582	111	0.523	131	0.497
12	0.475	32	0.475	52	0.474	72	0.479	92	0.581	112	0.521	132	0.496
13	0.475	33	0.475	53	0.474	73	0.481	93	0.578	113	0.519	133	0.495
14	0.475	34	0.475	54	0.474	74	0.484	94	0.575	114	0.518	134	0.495
15	0.475	35	0.475	55	0.474	75	0.489	95	0.571	115	0.516	135	0.494
16	0.475	36	0.475	56	0.474	76	0.494	96	0.568	116	0.515	136	0.493
17	0.475	37	0.475	57	0.474	77	0.501	97	0.564	117	0.513	137	0.492
18	0.475	38	0.475	58	0.474	78	0.508	98	0.560	118	0.512	138	0.491
19	0.475	39	0.475	59	0.474	79	0.517	99	0.555	119	0.511	139	0.491

Figure.148－データ表示例

6.5 Time Drive Run（タイムドライブ測定）

選択した Method／Data に保存されているパラメータを使って測定します。既存のデータファイルである場合は、メソッドを残してデータが削除されます。メソッドはパラメータダイアログボックスに表示され、変更が可能になります。これらのパラメータは、新規メソッドとして保存できます。

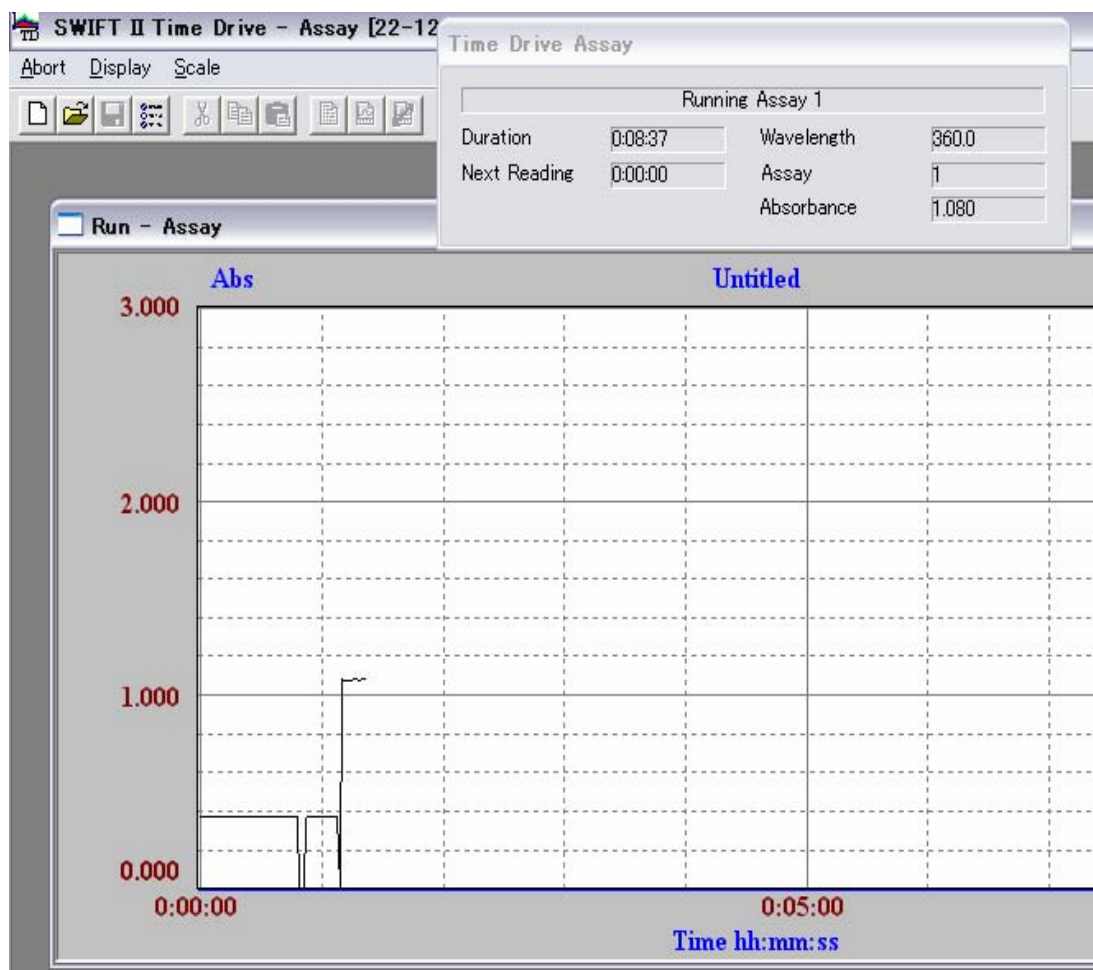



Figure.149－測定時画面表示例

測定中は上記のような画面になり、次の測定までの時間や終了までの時間、および各ポイントでの吸光度が表示されます。また Abort が表示され、測定を停止したい場合選択できるようになります。

6.5.1 Single Sample Mode（シングルサンプルモード）

このモードでは 1 つの同じサンプルに複数のアッセイを実行します。測定間隔がすべてのデータを集めるために十分な時間である場合、各アッセイにはそれぞれの異なった Wavelength、lag time、duration、period を使うことができます。パラメータ設定画面で、必要な内容を入力します。

Parameters
Parameters | Details | Display | Run Options
Assay Parameters
Time Units hh:mm:ss
Lag Time 0:00:00
Duration 0:10:00
Period 0:00:15
Wavelength(s) 360.0
1 of 3
Filename (Data) Assay
Temperature
On 20.0
Reference
None
Use Reference Blank
Use Sample (At Start)
Use Sample (At Lag Time)
Save
Lock
OK キャンセル 適用(A) ヘルプ

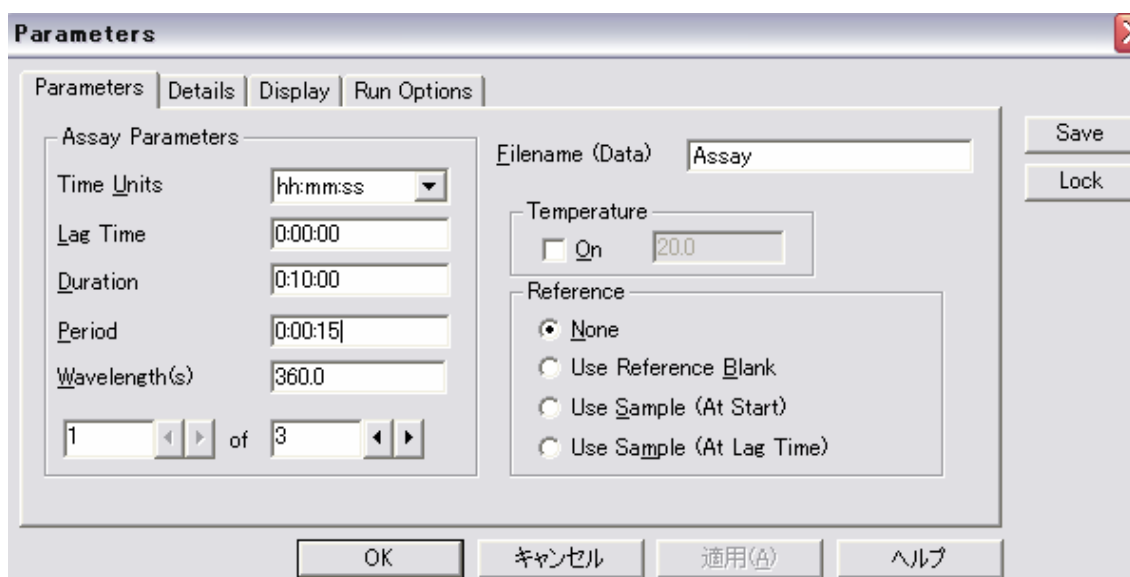



Figure.150－パラメータ設定画面例

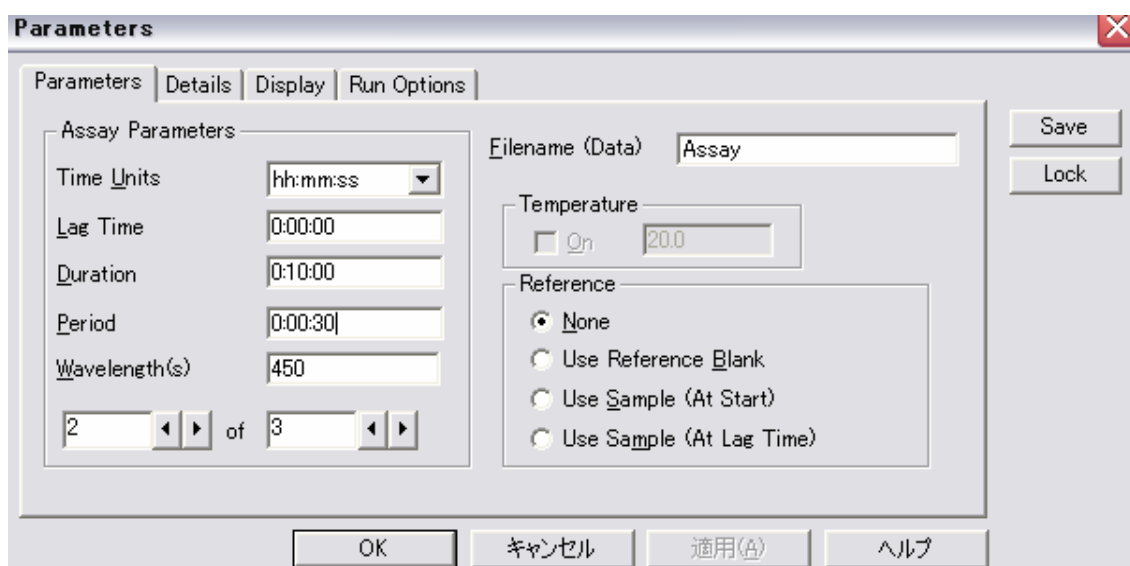



Figure.151－パラメータ設定画面例（2）

6.5.2 Use with Sipper（シッパーを用いた測定）

シッパーを利用する場合、シングルサンプルアッセイのみが適用できます。

6.6 Time Drive Post Run Options（ポストランオプション）

スキャン終了後、ポストランオプションが使用できます。

Post Run オプションには測定内容により Mathematics、Peak Find、Peak Area、Derivative および Trace が選択できるようになります。

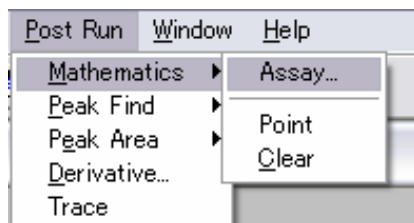



Figure.152－Post Run（Math）

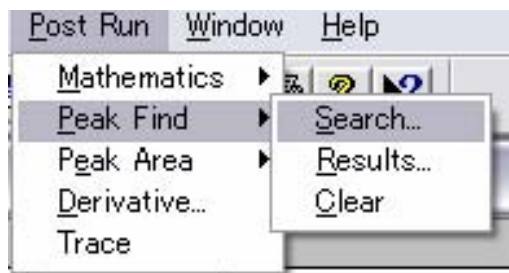



Figure.153－Post Run（Peak Find）

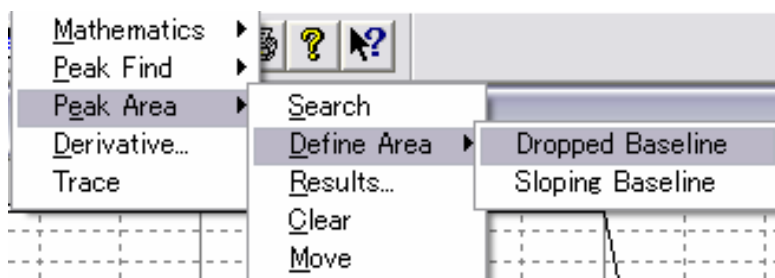



Figure.154－Post Run（Peak Area）

7. Quantification（定量）

7.1 はじめに

Quantification（定量）は、既知濃度と比較することで未知の濃度を測定する機能です。
このアプリケーションは 3 つのモードで作動します。

Factor　サンプルの濃度をその吸光度から既知のファクターを使って計算します。
Standard Curve　既知濃度の一連の Standard（標準）吸光度値をグラフ化し、Sample（サンプル）濃度を算出します。例えば、ブラッドフォード法を用いたタンパク質量決定、廃液中の金属錯体や塩、および殺菌剤の検出などがあげられます。
Substrate Concentration　既知濃度の一連の Standard 吸光度値における一定時間内の変化をグラフ化し、Sample 濃度を算出します。このような酵素を利用した基質濃度分析は、食品業界では構成物質定量（でんぷん、エタノール、糖分、乳酸など）用に、また、一般試薬キットを用いた臨床化学解析（凝固因子、コレステロール、ぶどう糖、クレアチン、尿素など）用にルーチン的に利用されます。

このプログラムはこの分析のために任意で設定したアッセイ時間の開始・終了時に吸光度を測定することにより至適化されています。（アッセイ時間は酵素反応の直線領域内に設定します）。

既存のデータは File>Find で検索、ロードすることができます。新規サンプルデータはこれら既存データに付加することで、品質管理等でのファイリング作業を簡略化できます。

この定量分析では、Standard は 20 個まで、Sample は 500 個まで測定できます。曲線調節オプションとして linear regression、liner interpolation、spline および manual の 4 種類が利用できます。

多サンプルを測定するためにセル 2 つで反応する場合、各サンプルについて異なるリ

ファレンスの測定を行う必要がある場合には、マルチセルチェンジャーを 2 連セルチェンジャーとして設定し、それぞれの測定結果を 1 つの表にまとめる機能を利用することができます。

7.2 Quantification Parameters（定量パラメータ）

測定は Standards および Samples の 2 段階で行われます。Samples では、対応する Standards データがある場合または Factor モードの場合にのみ測定できます。Standard Parameters を設定後 Run>Standards で Standard Curve が表示されます。それに対応するサンプルは Run>Samples で測定します。この時点で Sample Parameters が表示されます。

Standard の測定に必要なパラメータ設定は、3 ページに分割されています。これらのページでは、データ収集過程の様々な要素を説明しています。Parameter Sheet を開けると、状況に応じてこれらのページのいくつか、またはすべてのページが表示されます。

パラメータに連携したデータがある場合、そのパラメータは読み取り専用で、変更することはできません。同様に、Parameter で lock 機能を使用するとメソッドを起動、表示、実行できますが、パラメータを変更することはできません。

7.2.1 Standards Parameters and Details Page（スタンダードパラメータと詳細）

Parameters | Standards | Run Options

Title

Operator

Comments

Filename Assay

Wavelength 360.0 Temperature 20.0

Method

Factor

Standard Curve

Substrate Concentration

Figure.155－パラメータ設定画面

詳細事項を設定します:

Title　グラフに表示するタイトル

Operator オペレータ名

Comments　適用する備考

Filename データのファイル名。これはサンプルを測定した時間と日付同様自動的に作成されます。

パラメータを設定します:

Wavelength　データ収集時の波長

Temperature　ペルティエ装置の使用／不使用の選択と作動温度を選択します。

Method Substrate Concentration、Standard Curve または Factor から選択します。選択するメソッドによりパラメータが異なります。

Substrate Concentration 設定時にのみ対応するパラメータです:

Assay Lag Time　測定の開始時間を設定します。

Assay Duration　次測定の開始時間を設定します。

Method　平行して(parallel)アッセイを行うか設定します。

Factor 設定時にのみ対応するパラメータです:

Factor　測定吸光度値に適用するファクターを設定します。

注意:Factor モードが選択されている場合に Standard ページは作動しません。

7.2.2 Standards Concentrations Page(スタンダード濃度)

Parameters　Standards　Run Options
Concentrations
1　1.0000
2　2.0000
3　3.0000
4　4.0000
Define Standards
Units
mg/ml
Add
Edit
Remove
Standard Replicates
1

Figure.156－スタンダード濃度入力画面

Standard ページではスタンダードのサンプルの数およびそれぞれの濃度を入力します。Edit、Remove ボタンで初期設定を変更し、Add ボタンでスタンダードを追加してください。各スタンダードの濃度はダイアログボックスに表示されます。

Concentration　入力したスタンダードとその濃度を一覧表示します。

Units　データに適用する単位

Standard Replicates 各濃度において測定されるスタンダードの数

7.2.3 Run Options Page(ランオプションページ)

このページは測定中および完了後、次に実行する操作を設定します。

Figure.157－ランオプション設定画面

オプションは以下のとおりです:

Post run

Save　測定終了後、データを自動的に保存します。

Save Spreadsheet　データをスプレッドシート形式で保存します。

Print　データを Print のオプションによって設定された形式でプリントします。

Sample handling

Repeat reference　各サンプル測定(または繰り返し測定)前にリファレンスを測定します。セル位置 1 に入れてください。

リファレンスを繰り返し測定しない場合(Repeat reference が OFF の場合)は、必要なリファレンスは 1 つです。

Samples　使用するセル位置の数を定義します。セルチェンジャーは n 個のセル位置にあるサンプルのみを読み取るように設定されます(セルの数が限られている場合に便利です)。Substrate Concentration には適用できません。シングルセルフォルダ使用の場合(シッパーを利用する場合など)ここで入力するセル位置数は無効になります。

リファレンスを繰り返し測定する場合(Repeat reference が ON の場合)は、各サンプル測定(または繰り返し測定の各グループ)用にリファレンスが必要です。マルチポジションセルチェンジャー使用の場合はリファレンスをセル位置 1 に設置してください。

Samples　各リファレンスについて使用するサンプル繰り返し測定数(繰り返し測定するリファレンス含む)を設定します。2 回繰り返して測定する場合には「3」と入力します。セルチェンジャーはここで入力されたセル位置数のみ読み取りをします(セルの数が限られている場合に便利です)。Substrate Concentration には適用できません。

7.3 Quantification Display Options(表示オプション)

Quantification アプリケーションの View>Display の表示オプションでは、あらかじめ View>Graph または View>Results モードが選択されている場合によりその内容が異なります。

View>Graph 表示オプションではグラフグリッド線の表示を選択します。さらに、繰り返し測定値および Standards と Samples の平均値の表示を設定します。

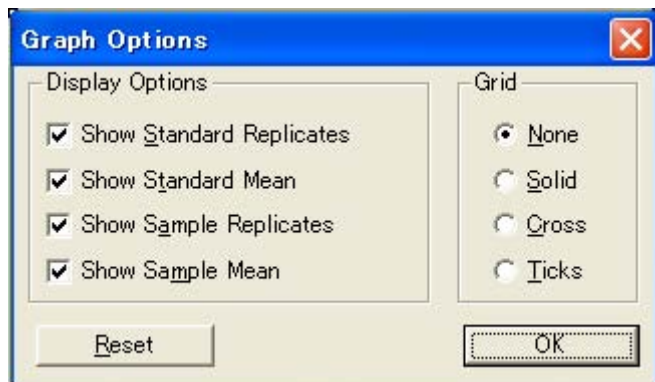



Figure.158－グラフオプション設定画面

View>Results 表示オプションでは、結果を表または行で表示するか、繰り返し測定値および標準誤差を表示するか選択します。日付、時間も表示できます。

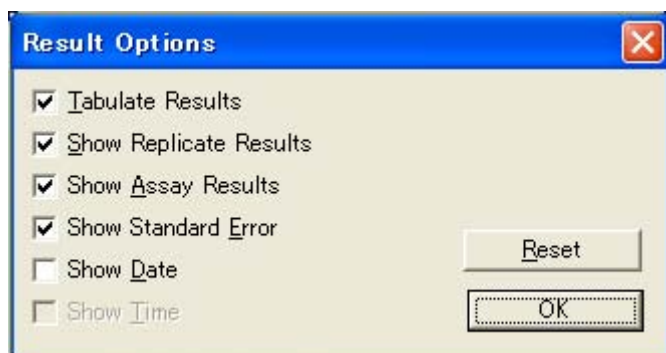
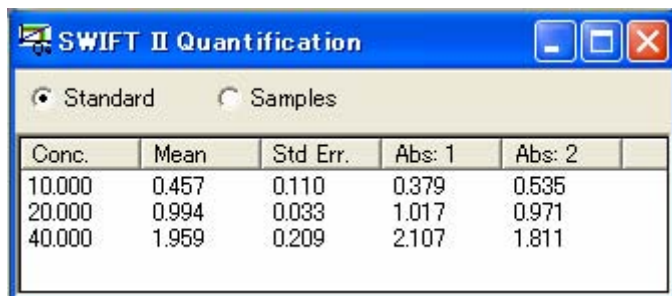
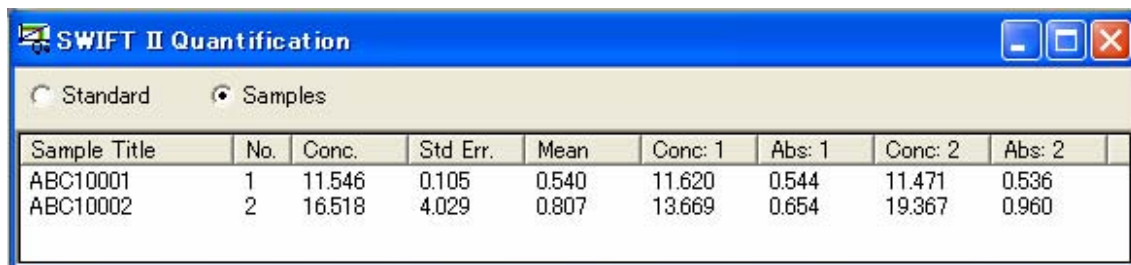



Figure.159－リザルトオプション設定画面

7.4 Quantification Data（定量データ）

データは吸光度測定値と濃度から構成されています。

Standard には入力した濃度値、繰り返し測定された吸光度値、平均吸光度値、および

繰り返し測定の標準平均値が含まれています。

SWIFT II Quantification

(•) Standard ( ) Samples

Conc.	Mean	Std Err.	Abs: 1	Abs: 2
10.000	0.457	0.110	0.379	0.535
20.000	0.994	0.033	1.017	0.971
40.000	1.959	0.209	2.107	1.811

Figure.160－結果表示例

Sample には反復測定された吸光度値と平均吸光度値、繰り返し測定された濃度と平均濃度値から成ります。View>Results オプションで表示されます。

SWIFT II Quantification

( ) Standard (•) Samples

Sample Title	No.	Conc.	Std Err.	Mean	Conc: 1	Abs: 1	Conc: 2	Abs: 2
ABC10001	1	11.546	0.105	0.540	11.620	0.544	11.471	0.536
ABC10002	2	16.518	4.029	0.807	13.669	0.654	19.367	0.960

Figure.161－結果表示例（2）

Standard Curve はサンプル結果とともにデータビューに表示されます。

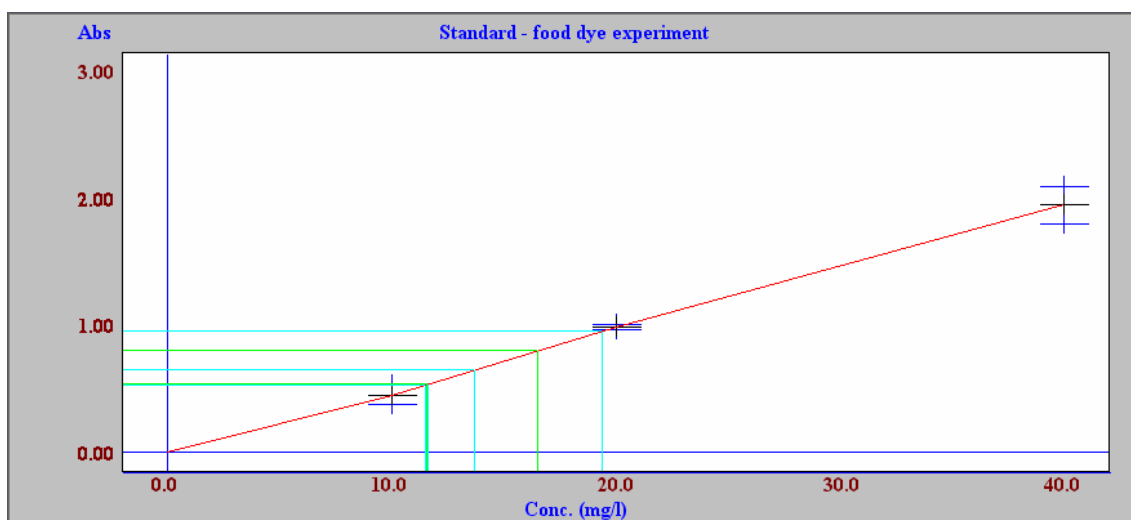



Figure.162－グラフ表示例

濃度は測定後編集することができます(吸光度値は不可)。表示されている曲線の編集を行うためには、View>Results から Samples を選択します。

View>Display で Tabulate Results オプションを OFF にします。任意の濃度値をダブルクリックして、編集できるようになります(監査機能が選択されている場合はこの変更事項は記録されます)。

7.5 Quantification Run(定量測定)

選択した Method／Data に保存されているパラメータを用いて、データを収集します。既存のデータファイルである場合は、メソッドを残してデータが削除されます。メソッドはパラメータダイアログボックスに表示され、変更が可能になります。これらのパラメータは新規メソッドとして保存できます。

7.5.1 Run>Standards

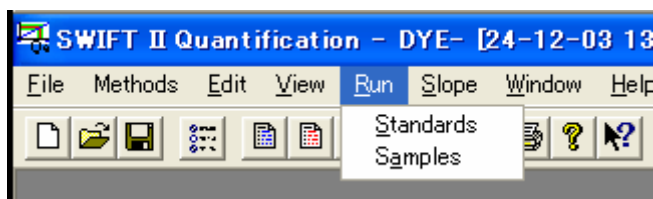



Figure.163－Run 選択画面

各スタンダードの濃度が表示され、つづいてそれぞれの吸光度値が表示されます。

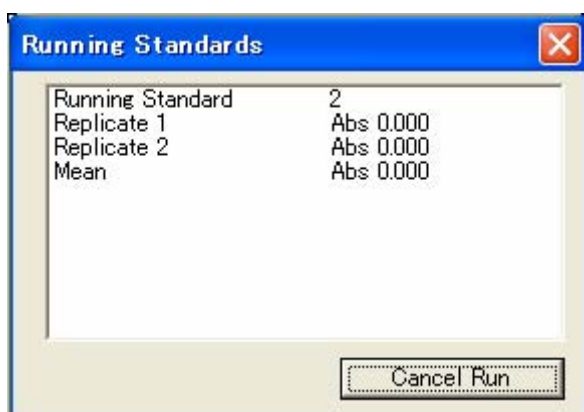



Figure.164－結果表示例

各スタンダードの反復測定値は、保存され、平均値が計算されます。平均吸光度値を

使ってスタンダード曲線を作成します。

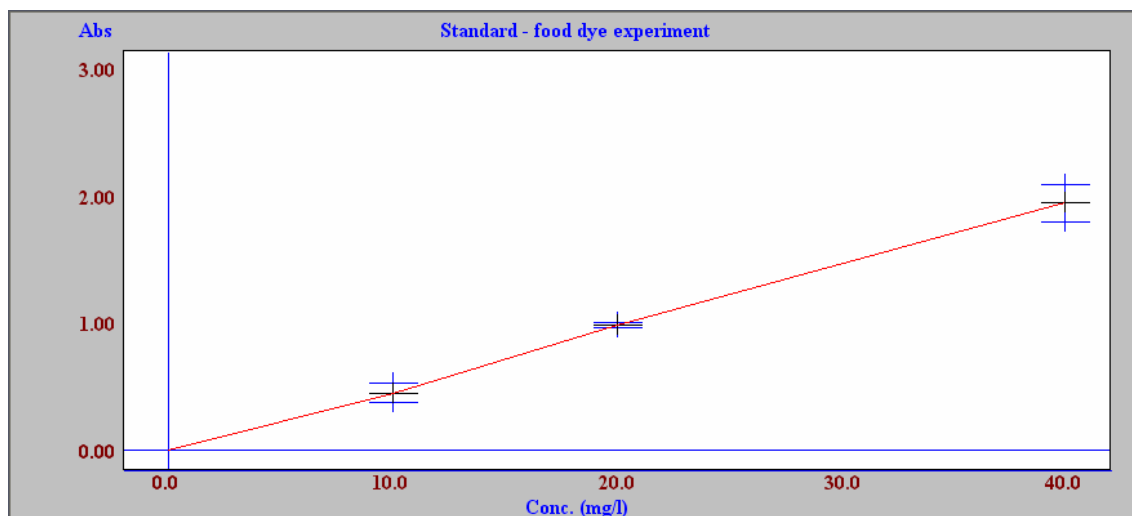



Figure.165－グラフ表示例

注意:スタンダードを保存するために個別のファイル名が作成されますが、変更もできます。

7.5.2 Run>Samples

各サンプルの番号と名前が Samples Parameters から適用されます。

下図のダイアログボックスが Run>Samples で表示されます。ここではサンプルとそれらの測定方法を設定します。ページにはサンプル名、サンプル反復測定数、ファイル名およびこれらのサンプルを既存ファイルに添付するかを設定します。

Figure.166－サンプル入力画面

Sample ページではサンプル数を入力します。Add sample ボタンを押してひとつずつ順に、または多数の場合には New Samples で任意の数を入力します。
オプションは以下のとおりです。

Append 既存データに結果を添付するかを設定します。選択した場合は、データがすでにロードされているため既存のファイル名が表示されます。

Filename データを保存するためのファイル名を設定します。

Sample Title サンプルリストが表示され、これにサンプルを別に加減できます。必要に応じて内容の簡単な説明などを個別に入力できます。

Sample Replicates 各サンプルについての反復測定数を設定します。

New Samples 新規のサンプルに属性名を設定します。番号は自動的に増分します。

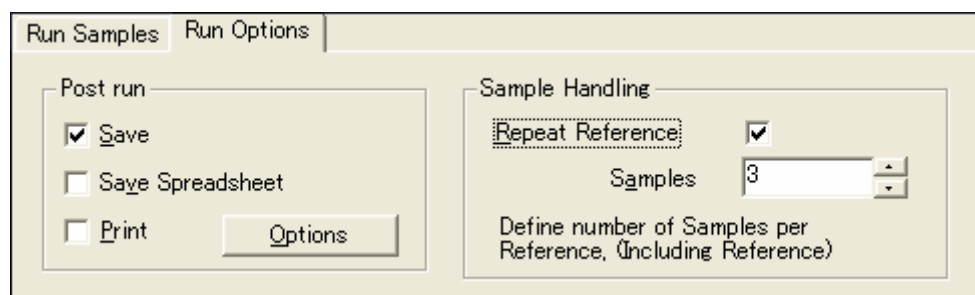



Figure.167ーランオプション設定画面

各サンプルの各反復測定値をスタンダード曲線と比較します。各サンプル結果は収集されリアルタイムで表示されます。これらの結果は前サンプルに加えられるか、もしくは新規リストが作成されます。新規リストが作成される場合、それに保存されるサンプルには個別のファイル名が作成されますが、変更することもできます。既存リストに加えられる場合は、もとのそのファイル名が使用されます。

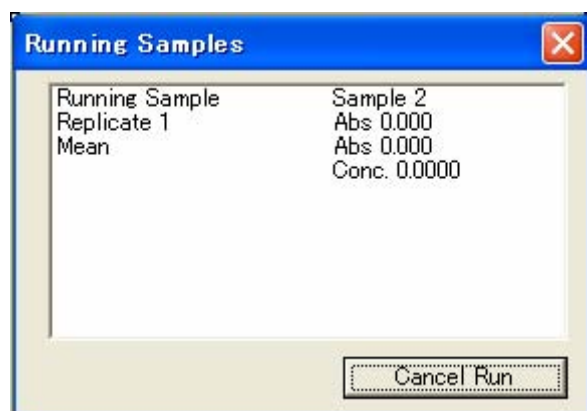



Figure.168－結果表示例

7.5.3 Use with Sipper（シッパーを用いた測定）

シッパーを利用する場合、リファレンスまたはサンプルをひとつずつロードします。ダイアログボックスが表示され、シッパーボタンを押します。そこでサンプル／リファレンスがロードされます。洗浄液をロードするオプションでは、ブランク液がロードされ、サンプルのロードに備えます。新たなサンプルをロードするときにはサンプル／リファレンス／洗浄液が必要です。

7.6 Quantification Post Run Options（ポストランオプション）

データ収集終了後ポストランオプションが使用できます。プリントと保存の前に、必要な機能を実行し、ビューを作成します。

Slope 中のチェックを変更することで、同一のデータから異なる形式のグラフが作成できます。

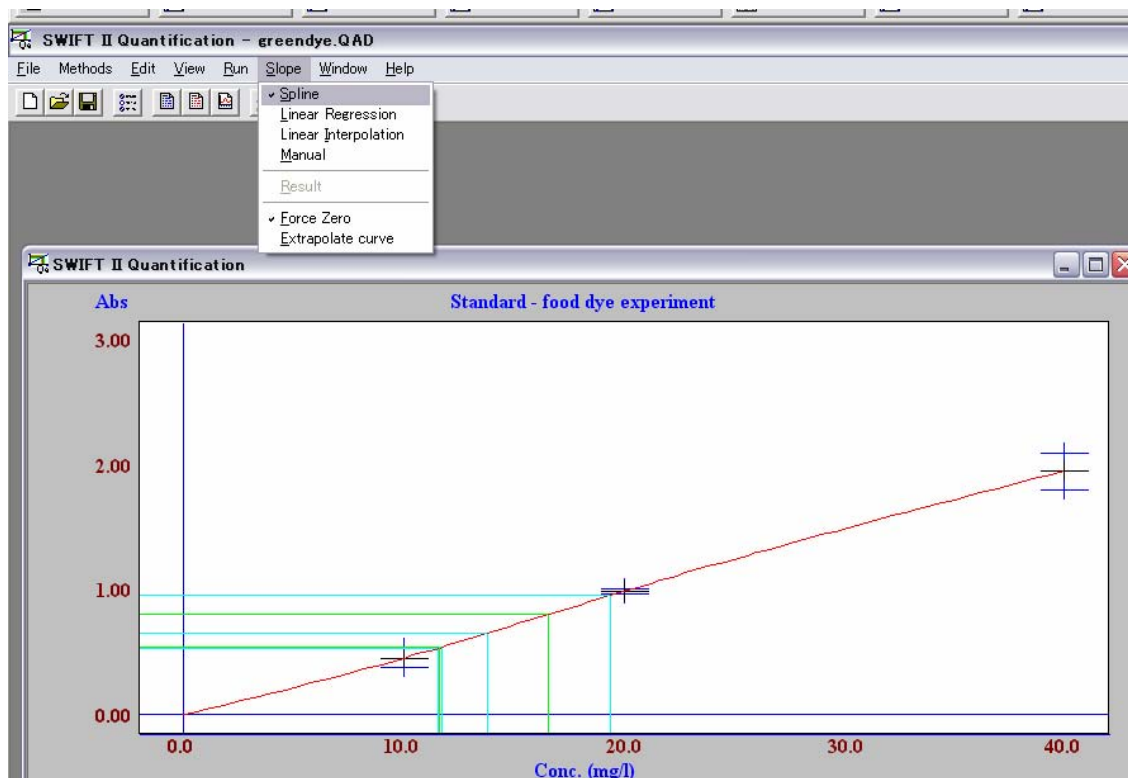



Figure.169－グラフ表示例

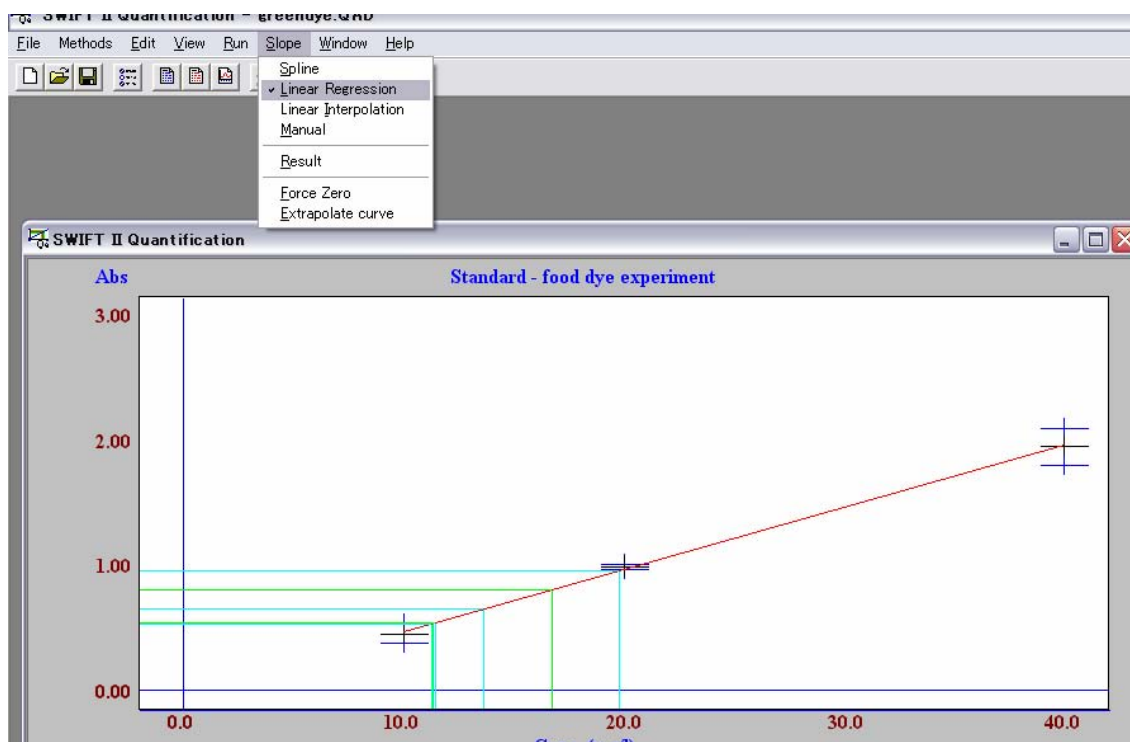



Figure.170ーグラフ表示例（変更後）

8. Multi Wavelength（多波長測定）

8.1 はじめに

Multi Wavelength（多波長測定）アプリケーションでは特定の多波長におけるサンプルの吸光度をそれぞれ比較し、任意のファクターを入力して分析します。ファクター入力は順序に従って行い、ユーザーの目的にあった数式を設定、メソッドとして保存できるので、実験系に合わせてプログラムをカスタマイズできます。

一般的な数式タイプは以下のとおりです。

Absorbance Ratio サンプル定量および純度分析（例：DNA／RNA）

Absorbance Difference 障害物によって生じるバックグラウンド吸光度を補正します。

3 Point Net スロープベースラインを含む濁液の正確なピーク高および領域を定義します。

Multiple Wavelength 多波長をリスト化し、自動的に測定します。

さらに特有の数式は以下のとおりです。

QC of batch vitamin A purity Parameter＝{(A325×6.815) - (A334×4.260) - (A310×

2.555)}/A325

Cobalt and Nickel determination Cobalt(g/l)＝{(12.259×A511) - (0.302×A720)}×dilution factor

Niclel(g/l)＝{(-0.403×A511) - (27.407×A720)}×dilution factor

既存のデータはFile>Find で検索、ロードできます。新規サンプルデータはこれら既存データに付加することで品質管理等においてもファイリングを簡略化できます。

8.2 Multi Wavelength Parameters（多波長パラメータ）

測定に必要な設定項目は、Equations、Details、Run Optionsの3ページに分割されています。Newを選択すると、3ページすべてが表示されます。

パラメータに連携しているデータが保存されると、そのパラメータは読み取り専用になり、変更することはできません。同様にParameter lock機能を使用した場合、メソッドをロード、表示、起動することはできますがパラメータを変更することはできません。

8.2.1 Equations Page（方程式ページ）

このページでは、方程式のパラメータを設定できます。

Figure. 171－ 設定画面

WavelengthとEquation Listという2つのセクションがあります。

Wavelengthセクションでは、波長値を設定して、これに名前を付ける事ができます。

1） Add Wavelengthボタンを押して、Wavelengthダイアログボックスを表示します。名前と波長値の設定をします。Titleに名前を付けると、Equation Listに一般的な方程式を設定するとき、波長値を変更しても、方程式を初めから定義するという操作を繰り返す必要がなくなります。

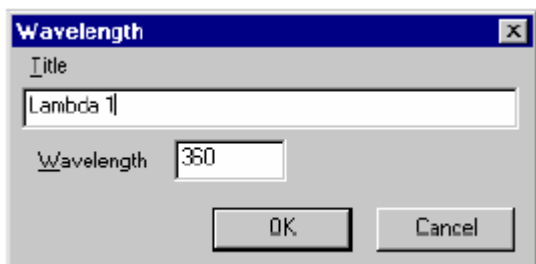



Figure. 172 –波長設定

Include all wavelength のチェックボックスをONにすると、リスト中の波長について、使用したすべての試料の吸光度が計測され、数学的なデータ操作を行わずに、吸光度の出力結果を得ることができます。

Edit Wavelength　選択した波長を変更します。

Remove Wavelength 選択した波長を削除します

Equation List セクションでは、設定された波長、定数、式の結果を組み合わせて、段階的に方程式を作成していくことができます。

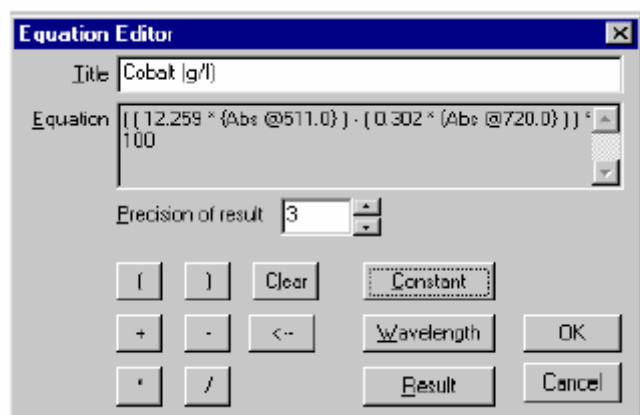



Figure. 173 –計算式の編集

1）Add Equationボタンを押すと、Equation Editorのダイアログボックスが表示され、方程式を作成できます

2）Titleに名前をつけます。Titleとは、式の結果の一覧表や出力結果に表示される文字列です。

3）四則演算子、カッコ、Constant、Wavelengthなどを使って、式を入力しま

す。

Constant　定数が入力できます。

Wavelength Select wavelengthダイアログボックスが表示されます。Wavelength Atを選んで波長値を入力したり、Wavelength ValueまたはWavelength Parameterを選んであらかじめ定義した名前や値を選択したりできます。

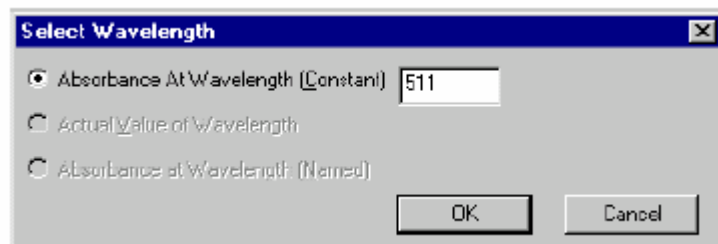



Figure. 174 -Select Wavelength in Equation Editor

Wavelength At　規定した波長での吸光度

Wavelength Value　波長自体の値

Wavelength Parameter　Wavelengthセクションで命名した波長での吸光度

Result ボタンを押すと、既存の有効な方程式の一覧から式のタイトルを選択して、先に求めた式の結果を方程式中に挿入することができます。

Clearボタンは入力した式をすべて消去します。

Back Spaceボタン(←)は、最後に入力されたパラメータを削除します。方程式の途中からは編集できません。

Precision of resultでデータを見やすく表示するために、小数点以下の桁数を指定できます。

Equation Editorの使い方の例を示します。

この例では、次の方程式を入力する方法について示しています。

Cobalt (g/l) = ((12.259 * A511) - (0.302 * A720)) * 100

1) Equation ListセクションのAdd Equationボタンを押します。

2) Titleを入力します(Cobalt (g/l))。

3) 「(」を2回押します。

4) Constantボタンを押し、12.259 と入力します。

5)を押します。

6) Wavelengthボタンを押し、Wavelength Atに511と入力します。

7) 「)」を押します。

8) 「-」を押し、「(」を押します。

9) Constantボタンを押し、0.302 と入力します。

10) 「＊」を押します。

11) Wavelengthボタンを押し、Wavelength Atに720と入力します。

12) 「)」を2回押します。

13) 「＊」を押します。

14) Constantボタンを押し、100 と入力します。

15) OKボタンを押します。

16) 式をチェックします。

17) Saveボタンを押します。

8.2.2 Details Page（詳細ページ）

Equations | Details | Run Options

Title

Operator

Comment

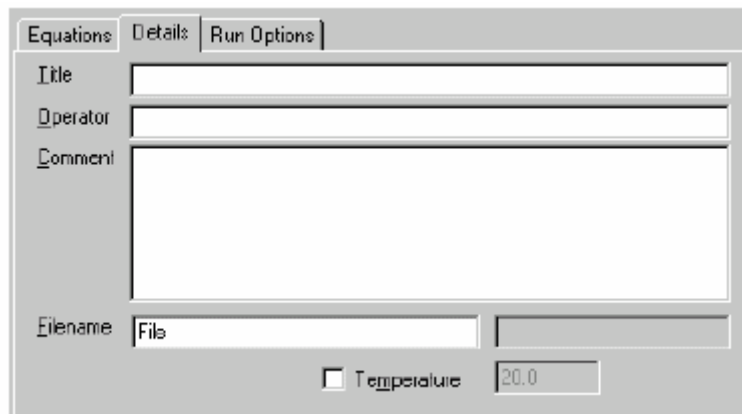
Filename File

Temperature 20.0

Figure. 175 ー詳細入力画面

このページではユーザーのパラメータを設定します。

Title グラフに表示するタイトル

Operator 使用者名

Comments コメント

Filename データのファイル名。これは自動的に作成されます。

Date サンプルを測定した時間と日付。

Temperature ペルティエ装置の使用／不使用の選択と作動温度を設定します。

8.2.3 Run Option Page（ランオプションページ）

このページでは測定中および測定後に実施する操作を設定します。

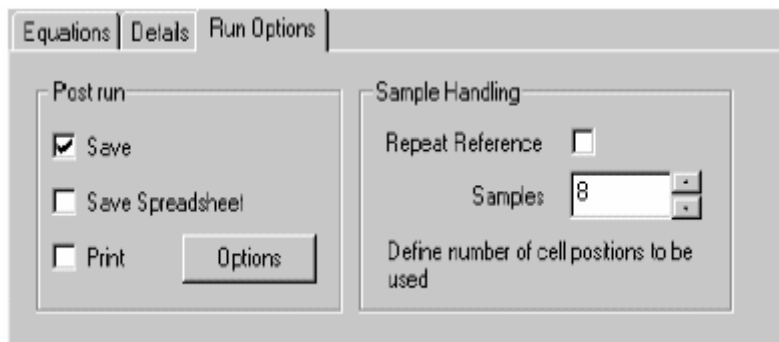



Figure. 176－ランオプション設定画面

オプションは以下のとおりです。

Post run

Save 測定終了後データを自動的に保存します。

Save Spreadsheet データをスプレッドシート形式で保存します。

Print データをprintオプションで設定した形式でプリントします。

Sample handling

Repeat reference 各サンプル測定（または繰り返し測定）前にリファレンスを測定します。セル位置1に入れてください。

リファレンスを繰り返し測定しない場合（Repeat referenceがOFFの場合）は、必要なリファレンスは1つです。

Samples 使用するセル位置の数を設定します。セルチェンジャーはn個のセル位置にあるサンプルのみを読み

取るように設定されます（セルの数が限られている場合に便利です）。シングルセルフォルダ使用の場合（シッパーを利用する場合など）ここで入力するセル位置数は無効になります。

リファレンスを繰り返し測定する場合（Repeat referenceがONの場合）は各サンプル測

定（または繰り返し測定の各グループ）用にリファレンスが必要です。マルチポジションセルチェンジャー使用の場合はリファレンスをセル位置1に設定してください。
Samples 各リファレンスについて使用するサンプル測定数（繰り返し測定するリファレンス含む）を設定し
ます。2回繰り返して測定する場合には、「3」と入力します。セルチェンジャーはここで入力された
セル位置数のみ読み取りをします（セルの数が限られている場合に便利です）。

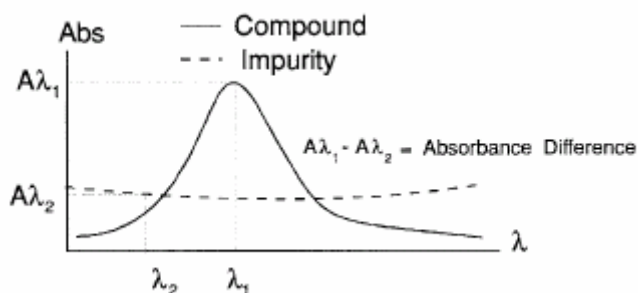
8.3 File（ファイル）

File 内のオプションについて説明します。

New　　新しい Method を作成し、そしてデフォルト値をセットします。あればデフォルトメソッドがロードされますが、なければ設定したデフォルトが使用されます。デフォルトメソッドのパラメータを変更するには"Default.**M"ファイルに新しい値を入れて上書き保存してください。プログラムは、パラメータダイアログボックスを自動的に開きます。このオプションはツールバーから利用できます。
Open　　選択したディレクトリ中のファイルを開きます。アプリケーションによって異なるデータタイプがロードされます。
Find　　特定のサンプル名でディレクトリ内を検索し、そのサンプルを含んでいるファイルをロードします。
Close　　このオプションは、選択しているビューを閉じます。
Save, Save As　　これらのオプションはデータをファイルに保存します。正確な操作は現行の状況により異なるので、Method File、Data File、Standard File または Spreadsheet File のいずれかに保存されます。
Export　スプレッドシートでの読解に適したフォーマットでデータを保存します。
Set-up　このオプションはアプリケーションのさまざまな設定をするためのタブ付きダイアログボックスを表示します。
Print　　このオプションはレポートを印刷します。Index、Graph、Spreadsheet、の各レポートについて印刷が可能です。内容は、 File>Set-up>Print Options ページで設定が可能です。

Print Preview　　指定したプリントフォーマットのプリントプレビューを PC 画面に表示します。Set-up>Print Options ページでフォーマットを調整できます。
Print Set-up　　プリンターを設定するために、Common Print Dialogue 機能を作動します。
Exit　　アプリケーションを終了します。

8.4 Method（メソッド）
Methodsには、あらかじめAbsorbance Difference Measurement、Absorbance Ratio Measurement、3 Point Net、DNA、RNA、Christian Warbergについての式が設定されています。各メソッドを選択後、左クリックでParameters（各種設定）、Display(Resultの表示内容)の確認、Run（測定）ができます。

Absorbance Difference Measurement（ 吸光度差測定）
吸光度差測定は、対象波長付近で吸収を持つ不純物についての補正を行う方法です。その不純物が色素試薬とは独立の自然の吸光度を持つ場合、基準液についての「基準設定」はできません。例としてはヘモグロビン存在下のメトヘモグロビンの測定などがあります。以下の図はその原理を示したものです。

化合物
不純物
Aλ1－Aλ2＝吸光度差
Figure.177－吸光度差の利用を示す図

Absorbance Ratio Measurement（吸光度比測定）
吸光度比は、純粋サンプルと比較して、サンプル調製における不純物の存在を測定

するものです。その測定で使用する2つの波長は、対象の基質のピーク吸光度波長(l max)と不純物のピーク吸光度波長です。純粋化合物のサンプル(すなわち、不純物が存在しない)が測定用に入手できれば、予想吸光度比を計算することができます。以降のサンプルがその結果と異なると、以下の図に示すようにサンプル中に不純物が存在することを示しています。

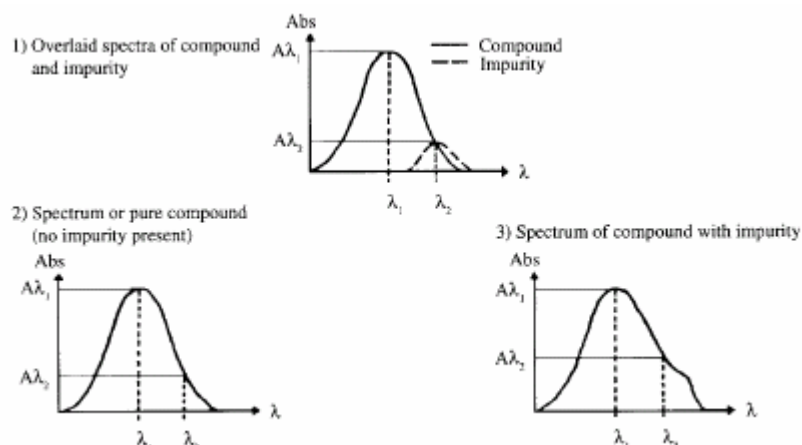



Figure.178－吸光度比の表現

1) 化合物および不純物の重なったスペクトル

2) 純粋化合物(不純物が存在しない)のスペクトル

3) 不純物の入った化合物のスペクトル吸光度比の利用を示すグラフ

吸光度比は、品質管理やサンプル純度が重要となるDNAやRNAのような実験室規模の検査に使用されます。DNAとRNAは260nmで吸収を持ちますが、その調製時に生成し得るタンパク質不純物は280nmで吸収を持ちます。

3 Point Net（ 3 点ネット）

3点ネットによって、傾斜したベースライン上に吸光度ピークがある場合、その吸光度ピークの真のピーク高さを測定することができます。例としては、血清中のヘモグロビンや羊水および混濁サンプル中のビリルビンの関与する測定があります。対象ピークλ2の両側にある2つの波長λ1とλ3での吸光度を測定し、単位波長当たりの吸光度の変化率(傾き)を計算します。真のピーク高さは、(λ2で測定した吸光度)－(λ1での吸光度＋λ2のバックグラウンド吸光度(傾きから計算))となります。

DNA

DNAの定量、純度確認についての式が設定されています。DNA溶液は光路長10 mmのセルで測定したときの260 nmにおける吸光度が1.0の場合、濃度が50 μgであることが知られており、この値をもとに定量することができます。セルの光路長が違う場合、希釈率を式に加える場合などは変更する必要があります。

DNA conc.＝ {Abs @260.0} * 50

DNA purity＝{Abs @260.0} / {Abs @280.0}

RNA

RNAの定量、純度確認についての式が設定されています。RNA溶液は光路長10 mmのセルで測定したときの260 nmにおける吸光度が1.0の場合、濃度が40 μgであることが知られており、この値をもとに定量することができます。セルの光路長が違う場合、希釈率を式に加える場合などは変更する必要があります。

RNA conc.＝ {Abs @260.0} * 40

RNA purity＝{Abs @260.0} / {Abs @280.0}

Christian Warberg（280 nm吸光度測定によるタンパク質定量）

ChristianとWarbergの式により、280 nmにおける吸光度に基づきタンパク質の定量を行います。タンパク質はチロシン、トリプトファン、フェニルアラニンなどのアミノ酸残基による280 nmの吸収に基づいて定量することができますが、この値はアミノ酸組成に依存しタンパク質間でかなり異なります。したがって、特定のタンパク質を定量するには、そのタンパク質に特異的な定数を決定しておく必要があります。

タンパク質溶液に核酸が混入している場合には、核酸の260 nmでの強い吸収がタンパク質の280 nmでの測定値に大きな影響を及ぼします。この影響は、酵母エノラーゼ結晶をもちいたChristianとWarbergの式で補償することができます。

Protein conc. (mg/ml) = (1.55 * {Abs @280.0}) - (0.76 * {Abs @260.0})

特定のタンパク質に対して計算式をカスタマイズするときは、各吸光度の定数1.55および0.76を変更してください。

User Method　ユーザーによって作成されたメソッドが、迅速にロードできます。最大 9 個のメソッドを設定できます。

Define Method　この機能では、ユーザー設定したメソッドを追加することができます。"Add"を押し、ダイアログボックスから必要なメソッドを選びます。メソッド名はテキスト上

でダブルクリックして変更できます。メソッドと名前をハイライトして Remove を押すとUser Method から削除されます。

8.5 Multi Wavelength Run（多波長測定）

選択したMethod／Dataに保存された設定項目を用いて測定を開始します。下図ダイアログボックスがRun>Samplesで表示されます。ここではサンプルとそれらの測定方法を設定します。ここではサンプル名、ファイル名およびこれらのサンプルを既存ファイルに添付するかを設定します。

Run Samples　　Sampleページではサンプル数を入力します。Add sampleボタンを押してひとつずつ順に、または多数の場合にはDefine Samplesで任意の数を入力します。

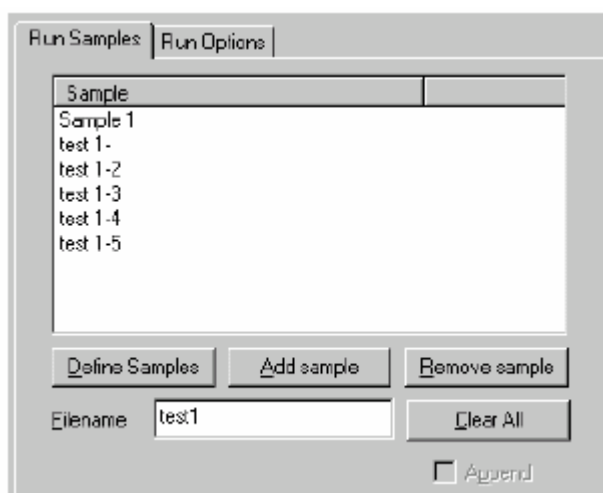



Figure. 179 ーサンプルパラメータ

Filename データを保存するためのファイル名を定義します。

Sample Title サンプルリストが表示され、これにサンプルを別に加減できます。必要に応じて内容の簡単な説明などを個別に入力できます。

Define Samples Define New Samplesダイアログが開きます。

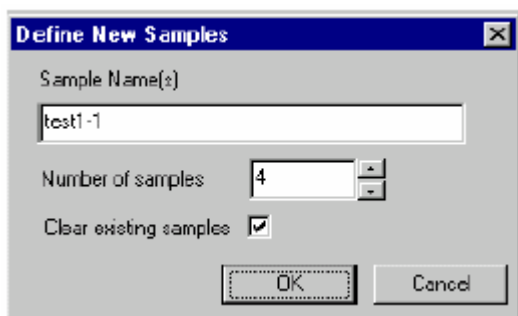



Figure. 180－新規サンプル設定

Sample Name(s)新規のサンプルにサンプル名を設定します。

Number of Samples　　サンプル番号は自動的に増分します。

Clear existing samples　　チェックを入れると、過去のサンプルを削除します。

Add sample

Remove sample

Clear All

Append 既存データに結果を添付するかを設定します。選択した場合は、データがすでにロードされているため既存のファイル名が表示されます。

Run Option　　Parametersで設定したRun Optionの内容と同じです。ここで変更することも可能です。

ParametersダイアログでOKボタンを押すと、各サンプルの各波長の測定を開始し、サンプルデータに保存されます。各サンプル結果は測定中リアルタイムで表示されます。

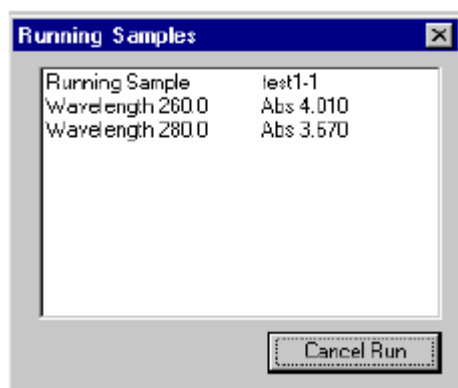



Figure. 181 -Run dialogue box（データ表示中）

これらの結果は前サンプルに加えられるか、もしくは新規リストが作成されます。新規リストが作成される場合、それに保存されるサンプルには特有の名前が作成されますが、変更することもできます。既存リストに加えられる場合は、もとのそのファイル名が使用されます。

8.5.1 Use with Sipper（シッパーを用いた測定）
シッパーを利用する場合、リファレンスまたはサンプルをひとつずつロードします。ダイアログボックスが表示され、シッパーボタンを押します。そこでサンプル／リファレンスがロードされます。洗浄液をロードするオプションは、ブランク液がロードされ、サンプルのロードに備えます。新たなサンプルをロードするときにはサンプル／リファレンス／洗浄液が必要です。

8.6 Edit（編集）
Clear　データセットからデータを削除します。データに関係しているビューはいずれも閉じられます。
Delete Del　ビューから現行のアイテムを削除します。

8.7 Multi Wavelength View Options（表示オプション）
Parameters　現行データのパラメータを表示します。
Display　部分的あるいは全体的に計算過程を表示させることができます。結果はhorizontal（行）またはvertical（列）で表示、プリントできます。これは、Results表示で設

定します。

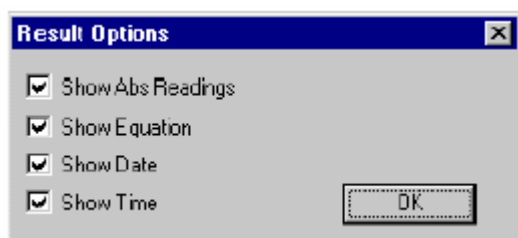



Figure. 182 -Multi Wavelength Display Options 表示オプション

Toolbar ツールバーの表示／非表示を選択します。

Status Bar ステータスバーの表示／非表示を選択します。

8.8 Calculator（計算）

入力したオリゴヌクレオチドの塩基配列の理論的融解温度を算出するTm計算機能を示します。

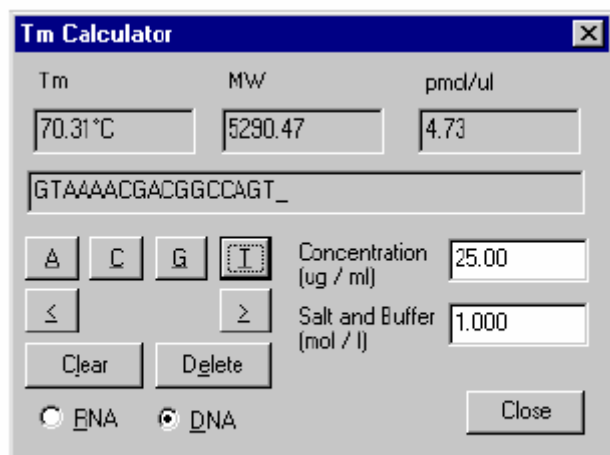



Figure 44 - Tm Calculator

Figure.183－Tm 計算

Tm 計算機能は既知塩基配列をもつオリゴヌクレオチドの理論的 Tm 値を既知の熱力学値をもとに計算します。塩基配列は RNA あるいは ssDNA サンプル（前者では T の代わりに U 使用）として画面に入力します。計算式が適合される範囲は 16～64mer です。オリゴヌクレオチドの液中濃度（μg／ml）と塩およびバッファーの合計モル濃度（mol／l）を入力します。＜ ＞キーを使って配列中に塩基を挿入できます。

この計算機能では、オリゴヌクレオチドの分子量および濃度（pmol／μl）を表示するためシークエンシングなどに便利です。

背景にメソッドがロードされている場合は、計算値をプリントすることもできます。

8.9 Multi Wavelength Post Run Options（ポストランオプション）
Multi Wavelengthアプリケーションにはポストランオプションはありません。

8.10 Window（ウィンドウ）
Tile　ディスプレイ上で見える全てのビューを並べて、メインウィンドウに全て表示します。
Cascade　全てのビューを順に重ねて表示します。
Arrange Icons　メインウィンドウの下部に全てのアイコンを並べます。
View　特定のビューを選択し、それを前面に置き、必要に応じて拡大します。

8.11 Help（ヘルプ）
Using Help　ヘルプ機能の使い方を説明します。
Index　ヘルプ機能のインデックスを表示します。
About　製作者の情報を表示します。

9. FRACTION ANALYSIS（フラクション解析）

9.1 はじめに
Fraction Analysis アプリケーションは、クロマトグラフィーで回収された多数の微量溶液を分析するために使用します。測定した吸光度値は棒グラフまたは折れ線グラフに表示され、領域を特定して、ズームによりさらに調べることができます。
既存のデータは File>Find で検索、ロードすることができます。新規サンプルデータはこれら既存データに付加することで品質管理等においてファイリングを簡略化できます。

9.2 Fraction Analysis Parameters（フラクション解析パラメータ）

測定に必要なパラメータは、下記のように 3 ページに分割されています。これらのペー

ジでは、データ収集に必要な要素を設定できます。Parameter Sheet を開けると、状況に応じてこれらのページが部分的または全体的に表示されます。New を選択すると、3 ページすべてを開くことができます。
パラメータに連携しているデータが保存されていると、パラメータは読み取り専用になり、変更することはできません。同様に Parameter lock 機能使用するとメソッドをロード、表示、起動できますが、パラメータを変更することはできません。

9.2.1 Parameters Page（パラメータページ）

Parameters | Display | Run Options

Title

Operator

Comments

Filename Assay

Wavelength 360.0 Temperature 20.0

Figure.184－パラメータ設定画面

このページでは、ユーザーパラメータを設定します。

Title　グラフ表示するタイトル

Operator　オペレータ名

Comments　適用する備考

Filename　データのファイル名。これは自動的に作成されます。

Date　サンプルを測定した時間と日付

Wavelength　データ収集時の波長

Temperature　ペルティエ装置の使用／不使用の選択と作動温度を設定します。

9.2.2 Display Page（表示ページ）

Parameters Display Run Options
Grid: None, Cross, Solid, Ticks
Graph: Line, Bar
Axis: Abs, %
Reset

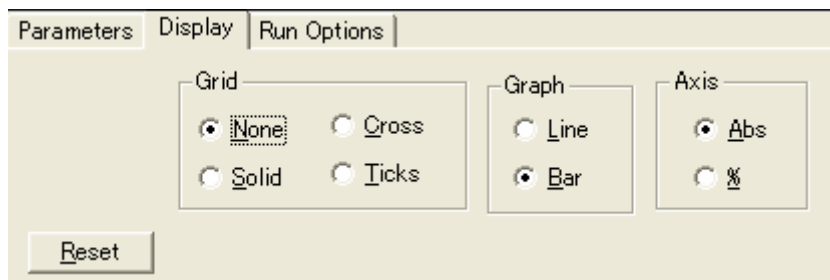



Figure.185ーグラフ表示設定画面

このページは測定中の実験の表示方法を設定します。

Grid　　グリッドの表示

Graph　折れ線または棒グラフの選択

Axis　　実測値の選択またはパーセント表示の選択

9.2.3 Run Options Page（ランオプションページ）

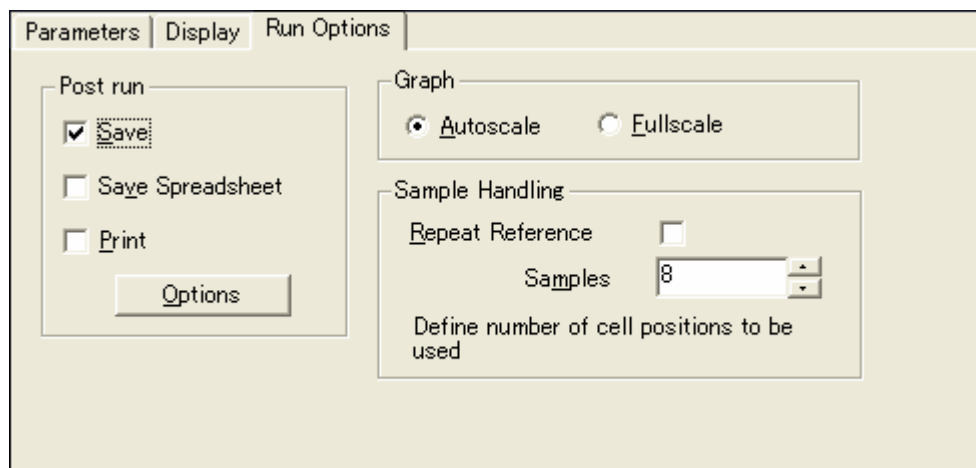



Figure.186ーランオプション設定画面

このページは測定中および終了後に実行する操作を設定します。

以下のオプションがあります。

Post run

Save　　測定終了後、データを自動的に保存します。

Save Spreadsheet　Save Spread Sheet データをスプレッドシート形式で保存します。

Print　　Print オプション 機能で設定した形式でデータをプリントします。

Graph

Display Graph　測定前にグラフを表示します。

Autoscale測定後グラフを自動的にスケールします。

Full-Scale　測定後グラフを最大サイズに拡大します。

Sample handling

Repeat reference　各サンプル測定(または繰り返し測定)前にリファレンスを測定します。セル位置 1 に入れてください

リファレンスを繰り返し測定しない場合(Repeat reference が off の場合)は、必要なリファレンスは 1 つです。

Samples 使用するセル位置の数を設定します。セルチェンジャーは n 個のセル位置にあるサンプルのみを読み取るように設定されます(セルの数が限られている場合に便利です)。シングルセルフォルダ使用の場合(シッパーを利用する場合など)ここで入力するセル位置数は無効になります。

リファレンスを繰り返し測定する場合(Repeat reference が on の場合)は各サンプル測定(または繰り返し測定の各グループ)用にリファレンスが必要です。マルチポジションセルチェンジャー使用の場合はリファレンスをセル位置 1 に設定してください。

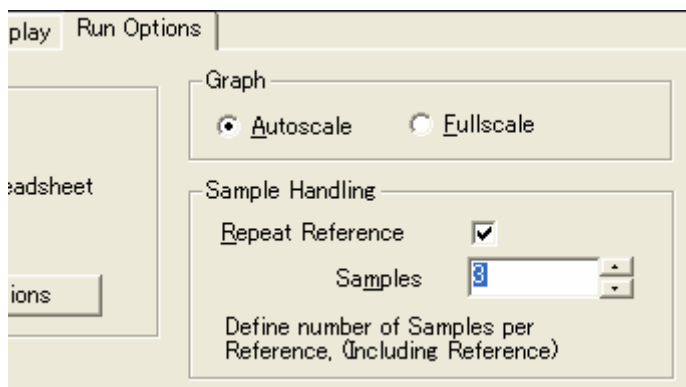



Figure.187ーリファレンス測定設定

Samples 各リファレンスについて使用するサンプル測定数(繰り返し測定するリファレンス含む)を設定します。2 回繰り返して測定する場合には、「3」と入力します。セルチェンジャーはここで入力されたセル位置数のみ読み取りをします(セルの数が限られている場合に便利です)。

n position changer　セルチェンジャーは n 個のセル位置にあるサンプルのみを読み取るように設定されます（セルの数が限られている場合に便利です）。

reference リファレンスは常にセル位置　1　に設定されます（サンプル毎に異なるリファレンスを使う場合に便利です）。

9.3 Fraction Analysis Display Options（表示オプション）

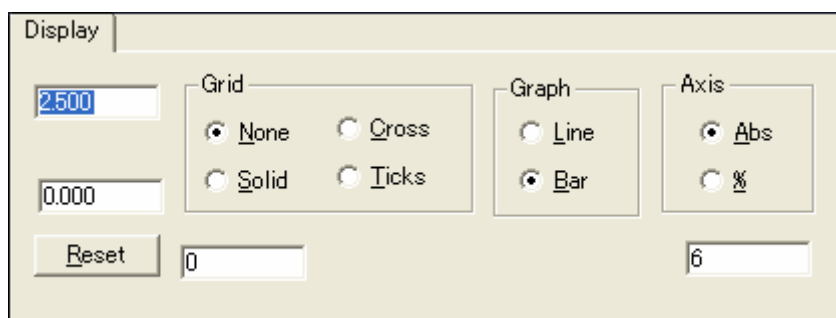



Figure.188ーグラフ表示設定画面

Fraction Analysis アプリケーションの view>Details の表示オプションではグラフ軸の設定およびグラフグリッド線の表示を選択します。これらは Graph ビューに表示されます。Results ビューでは表示されません。

アプリケーションに特有で、ON/OFF　選択ができるオプションはグラフおよび軸フォーマットです。

9.4 Fraction Analysis Data（フラクション解析データ）

データは特定波長に対する吸光度値と分画番号がになっています。実測データは Results ビューまたは Graph ビューで表示され、Graph ビューでは折線または棒グラフでフォーマットできます。個々の分画結果は削除できますが、データは修正できません。

Results　ビュー

Sample Title	No.	Abs
Sample 1	1	0.117
Sample 2	2	0.412
Sample 3	3	1.100
Sample 4	4	2.130
Sample 5	5	0.649
Sample 6	6	0.077

Figure.189－結果表示例

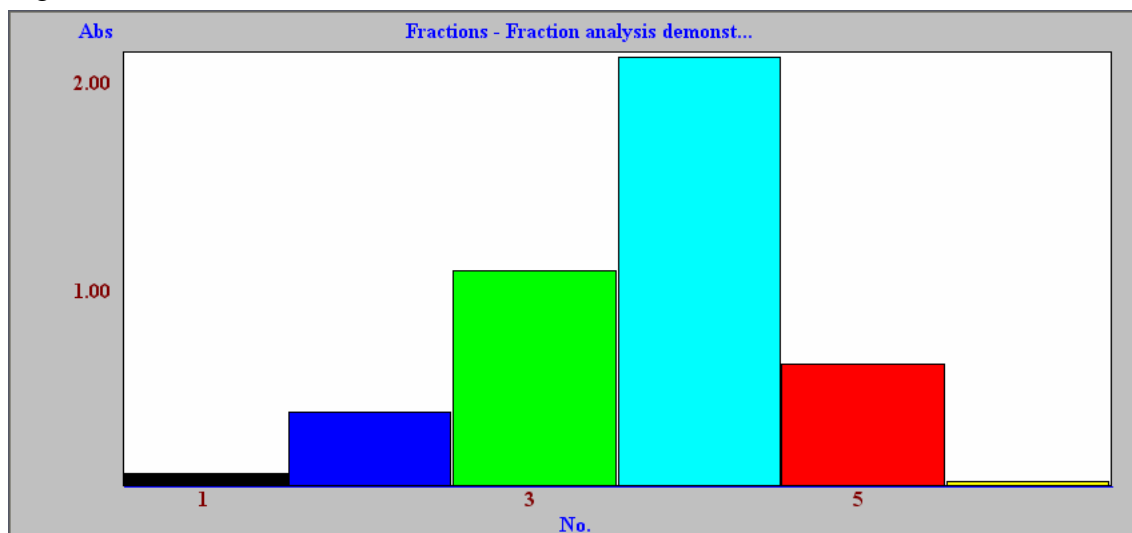



Figure.190－グラフ表示例（棒グラフを指定した場合）

9.5 Fraction Analysis Run（フラクション解析測定）

選択された Method／Data に保存されているパラメータを用いて、データを収集します。既存のデータファイルである場合は、メソッドを残してデータが削除されます。メソッドはパラメータダイアログボックスに表示され、変更が可能になります。これらのパラメータは新規メソッドとして保存できます。各サンプルの番号と名前は Samples Parameters から適用されます。

下図のダイアログボックスが Run>Samples で表示されます。ここではサンプルとそれらの測定方法を設定します。ページにはサンプル名、ファイル名およびこれらのサンプルを既存ファイルに添付するかを設定します。

Run Samples | Display | Run Options

Sample
Sample 1
Sample 2
Sample 3
Sample 4
Sample 5
Sample 6

Define Samples | Add sample | Remove sample

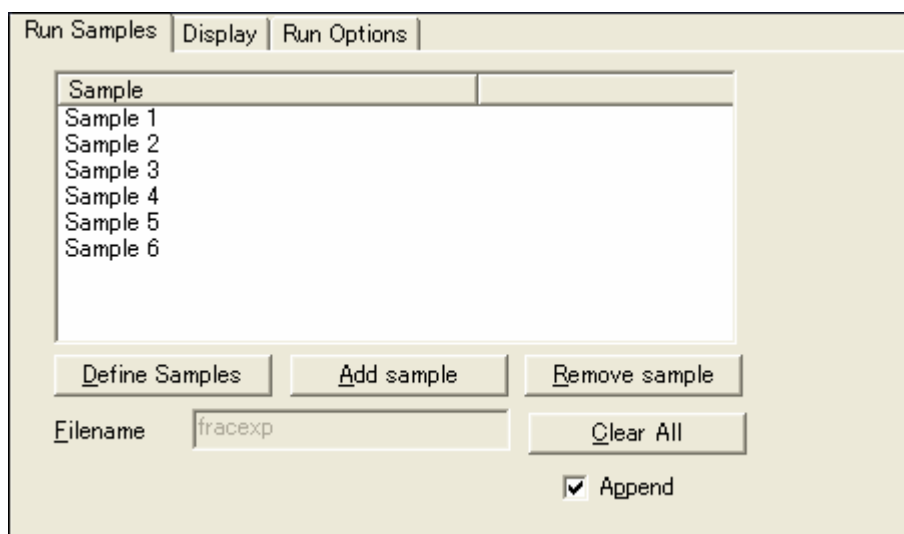
Filename fracexp | Clear All

Append

Figure.191ーサンプル設定画面

Samples ページではサンプル数を入力します。Add sample ボタンを押
してひとつずつ順に、または多数の場合には New Samples で任意の数を入力します。
オプションは以下のとおりです。

Append　既存データに結果を添付するかを設定します。選択した場合は、データがすでにロードされているため既存のファイル名が表示されます。

Filename データを保存するためのファイル名を設定します。

Sample Title　　サンプルリストが表示され、これにサンプルを別に加減できます。必要に応じて内容の簡単な説明などを個別に入力できます。

New Samples　　新規のサンプルに属性名を設定します。番号は自動的に増分します。

Define New Samples

Sample Name(s)
Sample 1
Number of samples 1
Clear existing samples

OK | Cancel

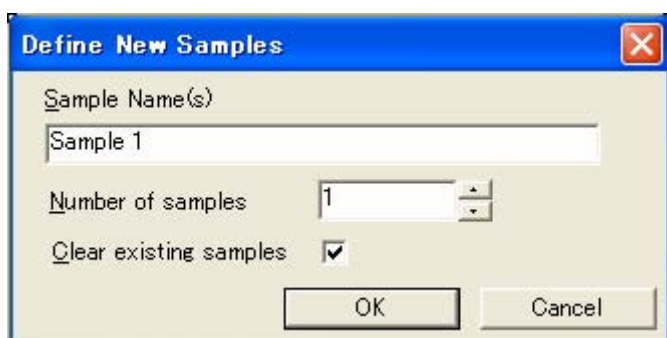



Figure.192ーサンプル追加画面

各サンプルの番号と名前は Sample List から適用されます。任意の波長での吸光度測定値は各分画毎に測定され、サンプルデータに保存されます。各サンプル結果は収

集されるリアルタイムで表示されます。これらの結果は前サンプルに加えられるか、もしくは新規リストが作成されます。新規リストが作成される場合、それに保存されるサンプルには特有の名前が作成されますが、変更することもできます。既存リストに加えられる場合は、もとのそのファイル名が使用されます。

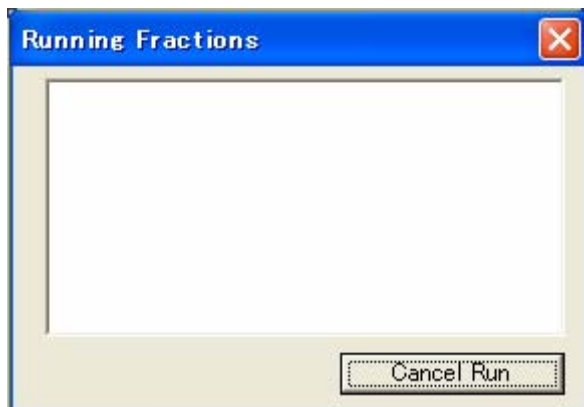



Figure.193－測定中画面

9.5.1 Use with Sipper（シッパーを用いた測定）

シッパーを使用する場合、リファレンスまたはサンプルをひとつずつロードします。ダイアログボックスが表示されシッパーボタンを押します。そこでサンプル／リファレンスがロードされます。洗浄液をロードするオプションでは、ブランク液がロードされ、サンプルのロードに備えます。新たなサンプルをロードするときにはサンプル／リファレンス／洗浄液が必要です。

9.6 Fraction Analysis Post Run Options（ポストランオプション）

Fraction Analysis アプリケーションには Post Run オプションはありません。

10. Tm, MELTING POINT（Tm 融点温度測定）

10.1 はじめに

Tm アプリケーションは、指定された温度域において加熱／冷却を一定速度で行い、核酸溶液および核酸/タンパク質混合液の 260nm における吸光度を測定し、核酸サンプルの Tm 決定に用いられます。Tm（融点温度）は 50%の核酸が変性する温度で、塩基組成や、水素結合による塩基間の相互作用により変化する物理的特性です。ゲノム DNA のような大きな DNA 断片や核酸とタンパク質が相互作用をしているような場合、Tm 値を実験的に決定しなくてはなりませんが、塩基組成が既知である合成オリゴヌクレオチドやプライマーの場合は、既成の熱力学的数値による Tm の理論的計算が可能です。Tm の定量結果は 1 次微分で解析できます。

このアプリケーションでは、温度設定をするためペルティエ温度コントロールユニットおよび、耐熱性のセルフォルダが必要です。

10.1.1 温度コントロールユニットとセルフォルダ

必要なユニットは下記のとおりです。

Figure.193 － ペルティエ電子温度コントロールユニット 80-2105-49

Figure.194－Tm 値測定用プログラマブルペルティエセルフォルダ 80-2107-14

ペルティエ電子温度コントロールユニットはコンピューター制御となり、ユニット正面部のスイッチによる温度設定はできません。

このアクセサリーを使用するには、RS232C のスペアシリアルのインターフェイスが必要です。コンピューターのシリアルマウスを使用する場合、全部で三種のシリアルインターフェイスが必要となります。（マウス用、Ultrospec 用、ペルティエ電子温度コントロールユニット用の 3 つです。）足りないときには、シリアルインターフェイスを拡張してください。

10.1.2 温度コントロールユニットとセルフォルダの設置

既存のセルフォルダをはずし、付属のベースプレートプラグと交換し、フィンガーロックを後方に押して据え付けます。

・セルフォルダ背面のケーブルをサンプルコンパートメント内部の該当ソケットにつなぎます。
・付属の 15-15 ピンケーブルで、分光光度計背面部のインターフェイス（AUX）と、ペルチティエ電子温度コントロールユニットのアクセサリソケットをつなぎます。
・付属の 15-15 ピンケーブルで、コンピューター背面部のスペアのシリアルインターフェイス RS232 と、ペルティエ電子温度コントロールユニットの RS232 ソケットをつなぎます。
・この装置は、SWIFT-Tm ソフトウエアで制御をします。

10.1.3 推奨セル
この装置には、光路長 10mm の UV 吸収型石英セルをご使用ください。またサンプル溶液の蒸発を防ぐため、栓付きタイプのセルをご使用ください。

スタンダードセル（栓付）2000 μl　　80-2002-70
セミマイクロブラックセル（栓付） 500 μl　　80-2002-81
50 μl またはそれ以下の微量測定用のセルはご使用になれません。

10.2 Tm Parameters (Tm パラメータ)
測定に必要な設定項目は、Parameters、Details、Display、Run Optionsの4ページに分割されています。Newを選択すると、4ページすべてが表示されます。
Parametersに連携しているデータが保存されると、その項目は読み取り専用になり、変更することはできません。同様にlock機能を使用した場合、メソッドをロード、表示、起動することはできますが項目を変更することはできません。

10.2.1 Parameters Page（パラメータページ）
このページではTm測定に必要な各項目を設定できます。

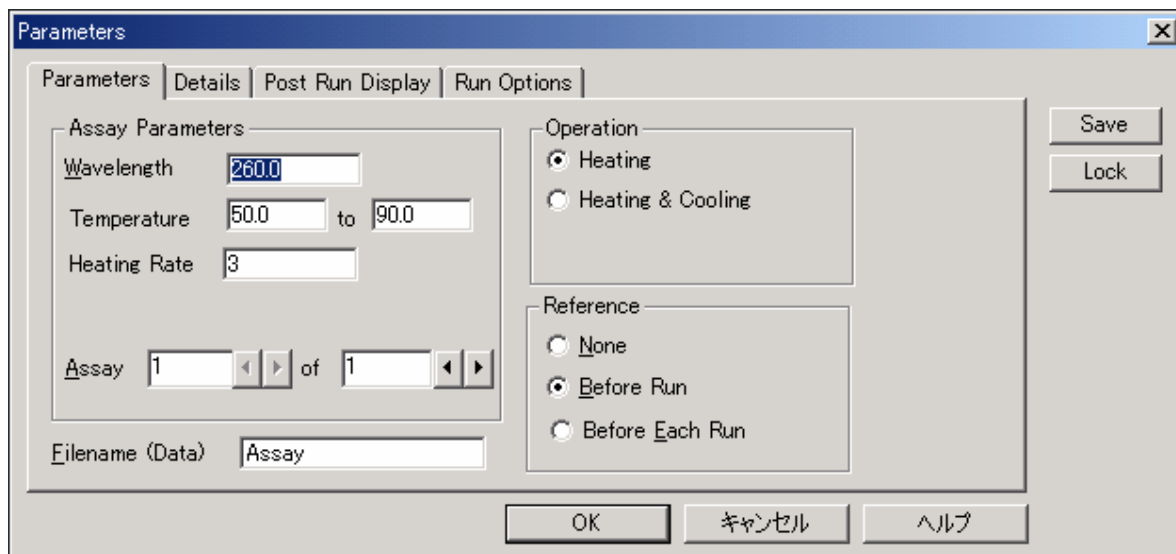



Figure 195 ーパラメータ設定画面

Assay Parameters:

Wavelength　測定波長を設定します。

Temperature　開始温度と終了温度をそれぞれ設定します。20～105℃の間で入力できます。

Heating rate　加熱温度を設定します。毎分0.1～3.0℃の間で入力できます。

Cooling rate　冷却温度を設定します。毎分0.1～2.0℃の間で入力できます。

Assay 同じパラメータで複数サンプルを測定する場合、必要に応じてサンプル数を設定します

Filename (Data)　Assayで設定した複数サンプルを測定する場合必要に応じ、ファイル名を設定します。この名前に測定日時をつけたものがFilenameとなります。

Operation:

Heating　加熱のみの設定です。

Heating & Cooling 加熱後、冷却します。

Delay サンプルの加熱/冷却間の遅延時間を分・秒で定義します。

Reference

None リファレンスを取りません

Before Run　測定前にリファレンスを取ります。

Before Each Run　1サンプルごと測定前にリファレンスを取ります。

10.2.2 Details Page（詳細設定ページ）

このページではユーザーパラメータを設定します。この項目は初期設定のままで、特に問題ありません。必要に応じて入力・設定してください。

Parameters　Details　Post Run Display　Run Options

Title

Operator

Comment

Assay　2

Filename　Assay-2 (18-12-01 11:59)　18/12/2001

Figure 196　ー詳細入力画面

Title　グラフに表示するタイトル

Operator　オペレータ名

Comments　コメント

Assay　Parametersで設定したAssay No.の数に従い、個々のアッセイについてDetailsの設定をします。

Filename　Parametersで設定したファイル名。1アッセイごとにサンプルを測定した時刻と日付がついた名前が自動的に作成されます。

10.2.3 Post Run Display Page（ポストランディスプレイページ）

このページでは、測定後にどのようにアッセイ状況を表示するかを設定します。この項目は初期設定のままで、特に問題ありません。必要に応じて入力・設定してください。

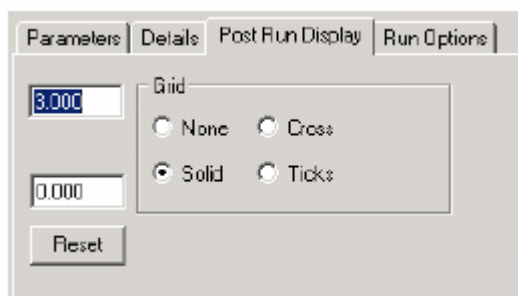



Figure 197 – ポストラン表示設定画面

Maximum Abs.　　表示する吸光度の最大値。 設定範囲は 0.0 ～ 3.0です。

Minimum Abs.　　表示する吸光度の最小値。 設定範囲は 0.0 ～ 3.0です。

Grid　　グラフのグリッド表示。

10.2.4 Run Options Page（ランオプションページ）

このページは測定が完了した後、自動的に実行する操作を設定します。この項目は初期設定のままで、特に問題ありません。必要に応じて入力・設定してください。

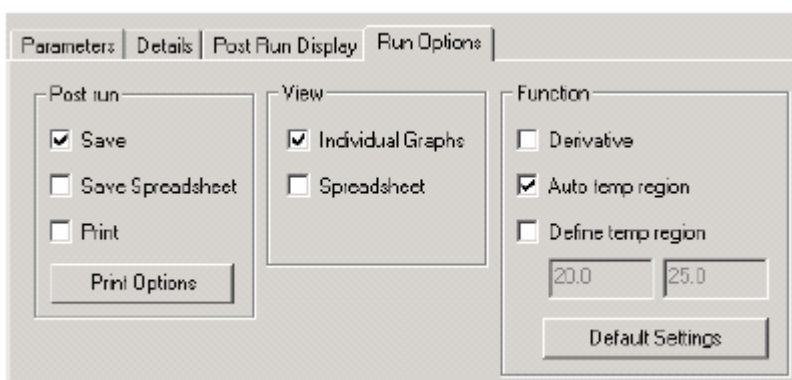



Figure 198ーランオプション設定画面

Post Run

Save　　測定終了後、データを自動的に保存します。

Save Spreadsheet　　データをスプレッドシート形式で保存します。

Print　　Print Option によって設定された形式でプリントします。

View

Individual Graphs　　アッセイ毎に個々のグラフが作成されます。

Spreadsheet 集められたすべてのデータを一連のスプレッドシートビューに表示します。

Function

Derivatives 各アッセイのデリバティブビューを自動的に作成します。

Auto temp region 吸光度変更が生じる温度範囲を自動的に表示します。

Define temp region Default Setting で定義した温度範囲を表示します。

Defaults Setting デフォルト値を設定するために使用します。

10.2.5 Tm File（Tm ファイル）

Open 選択したディレクトリ中のファイルを開きます。

Close 選択しているビューを閉じます。

Save, Save As データをファイルに保存します。保存先は現行の状況により異なり、Method File、Data File、Standard File または Spreadsheet File のいずれかに保存されます。

Export スプレッドシートでの読解に適したフォーマットでデータを保存します。

Set-up このオプションはアプリケーションのさまざまな設定をするためのタブ付きダイアログボックスを表示します。この章の「3.4 セットアップオプション」セクションをご覧ください。

Print このオプションはレポートを印刷します。レポートのスタイルはビュータイプによって変化します。Group Report、Data Report、Spreadsheet Report が可能です。内容は、 Set-up>Print Options ページ中の設定に依存します。

Print Preview 指定したプリントフォーマットのプリントプレビューを PC 画面に表示します。Set-up>Print Options ページでフォーマットを調整できます。

Print Set-up プリンターを設定するために、Common Print Dialogue 機能を作動します。

Exit アプリケーションを終了します。

10.3 Method（メソッド）

Default SWIFT II ソフトウエアにあらかじめ設定されている Method です。選択すると迅速にロードされます。

User Method　　ユーザーによって作成された Method をロードします。最大 9 個の Method を設定できます。
Define Method　　ユーザー設定した Method を追加することができます。選択すると、ダイアログボックスが表示されますので、"Add"を押し、さらに表示されたダイアログボックスから必要な Method を選びます。メソッド名はテキスト上でダブルクリックして変更できます。Method と名前をハイライトして Remove を押すと User Method から削除されます。
Default Settings　post run オプションを再設定できます。

10.4 Tm Run（実行）
現行のメソッドを実行します。システムは設定温度まで加熱されます。平衡に達するまで数分かかります。その後、リファレンスをセットし、サンプルを挿入します。システムは設定された割合で加熱されます。Heating and Cooling を選択している場合、最終目的温度に達してから、温度が下がり始めるまで遅延が生じます。

10.4.1 Run Parameters（実行パラメータ）
Run を選択すると接続機器を認識するので、分光光度計が初期化されます。設定のためにダイアログボックス（Run Parameters）が現われます。

Filename ファイルダイアログボックスから選択します。区別のために、-1、-2 と番号付けをします。
Reference　　　リファレンスを測定するかどうかを設定します。
Options　Setup メニューから Control Options ダイアログボックスを呼び出し、プリントする際のデータの体裁のフォーマットや、実験終了後に必要な操作を決定します。

OK を選択すると、サンプルフォルダのロードが必要になります。プログラムは、Parameters で設定された温度に到達するまで、開始しません。ある条件では、プログラムが優先することもあります。

10.4.2 Run Time View（ランタイムビュー）
データは測定と同時に（リアルタイムで）表示されます。解析中の未処理のデータは、

小さなウィンドウに表示されます。実験が終了すると、Run ウィンドウは自動的に閉じられ、データが表示されます。Heating and Cooling を選択している場合、目的温度に到達してから、cooling によって温度が下がり始めるまで遅延が生じます。実験が終了すると、Run ウィンドウは自動的に閉じられ、データが表示されます。

Abort　アボートオプションは解析中のみ使用可能で、直ちに測定を停止します。停止までのデータを保存するためのオプションがあります。

Hide/Show Display 解析を受ける未処理のデータ（現在の解析の段階、残り時間、次のデータ測定点までの時間、現時点での最新吸光度や勾配）は、リアルタイムで表示されています。解析中は、測定のデータを表示しているので、Menu バー上のオプションを使用します。

Window　Window メニューには、ウィンドウ表示、拡大、結果の算出法の定義、グラフのラベル付けのための、オプションがあります。

10.5 Tm Data Edit（編集）

このモードは、データがロードされているときにアクティブになります。

Copy Graph　ビットマップとしてクリップ・ボードにビューをコピーします。

Copy Data　選択されたデータをテキストフォーマットでクリップ・ボードにコピーします。

Label（Add、Edit、Move）　データビューにラベルを付加、編集、または移動します。このオプションはパレットから利用できます。グラフを表示する全てのビューに適用できます。

10.6 Tm View（ビュー）

Parameters　現行データのパラメータを表示します。

Spreadsheet　現行データのスプレッドシートを表示します。すでに開いている場合は、最前面に表示されます。

Overlay　オーバーレイビューを表示します。現行データを自動的にロードします。

Display　Set-up ダイアログのディスプレイページを開きます。選択されたビューオプションのみ変更できます。このオプションでは、吸光度及び時間軸の設定、Grid（グリッド）を On/Off することができます。ここでは、データの変更ではなく、表示の変更のみ

可能です。

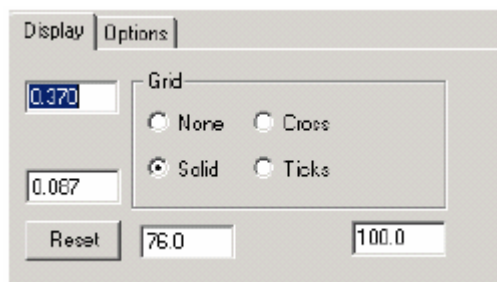



Figure 199 - Display Options

Calculator　　　　入力したオリゴヌクレオチドの塩基配列の理論的隔解温度を算出する Tm 計算機を表示します。

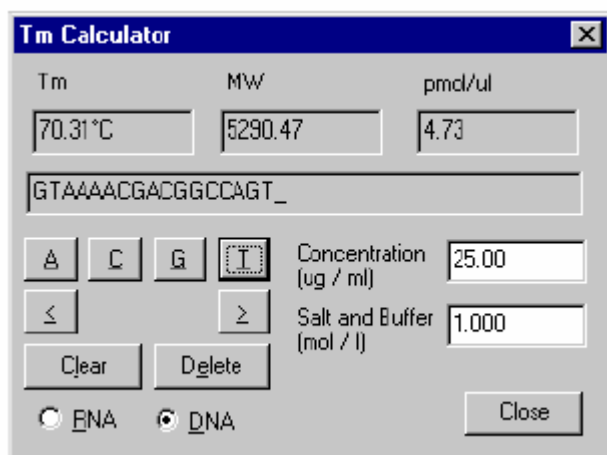



Figure.200－Tm 計算画面

Tm 計算機能は既知塩基配列をもつオリゴヌクレオチドの理論的 Tm 値を既知の熱力学値をもとに計算します。塩基配列は RNA あるいは ssDNA サンプル（前者では T の代わりに U 使用）として画面に入力します。計算式が適合される範囲は 16～64mer です。オリゴヌクレオチドの液中濃度（μg／ml）と塩およびバッファーの合計モル濃度（mol／l）を入力します。＜　＞キーを使って配列中に塩基を挿入できます。

この計算機能では、オリゴヌクレオチドの分子量および濃度（pmol／μl）を表示するためシークエンシングなどに便利です。

背景にメソッドがロードされている場合は、計算値をプリントすることもできます。

Scale（Auto、Full、Region、Zoom）　適切なスケーリング機能を適用します。Zoom はズームエリアをマウスで指定する必要がありますが、Auto、Full、そして Region はそ

のまま適用されます。

Unscale　Zoom と Scale オプションを回復します。

Toolbar　ツールバーの表示／非表示を選択します。

Status Bar　　　ステータスバーの表示／非表示を選択します。

Mouse Palette　　マウスパレットの表示／非表示を選択します。

10.7 Tm Post Run Options（Tmポストラン）

10.7.1Tm Calculation （Tm 値計算）

Auto Calculation　　このオプションは、変性開始点と、終結点を自動で決定します。Tm は、これらの二つの温度の中間点として計算されます。温度値を見るには、Display Results を開きます。

Manual このオプションは、変性の開始点から終結点までをマウスをドラッグすることにより、手動で決定します。Tm は、これらの二つの特定温度の中間点として計算されます。温度値を見るには、Display Results を開きます。

Clear Results　　表示した結果を消去します。

Display Results　　Auto もしくは Manual で設定された方法により計算された Tm を表示します。加熱曲線の場合でも冷却曲線の場合でも、セルフォルダのセンサーの温度とサンプルの温度（別々に測定されたとして）の間の温度の変動を考慮に入れるために、温度係数が入力できます。

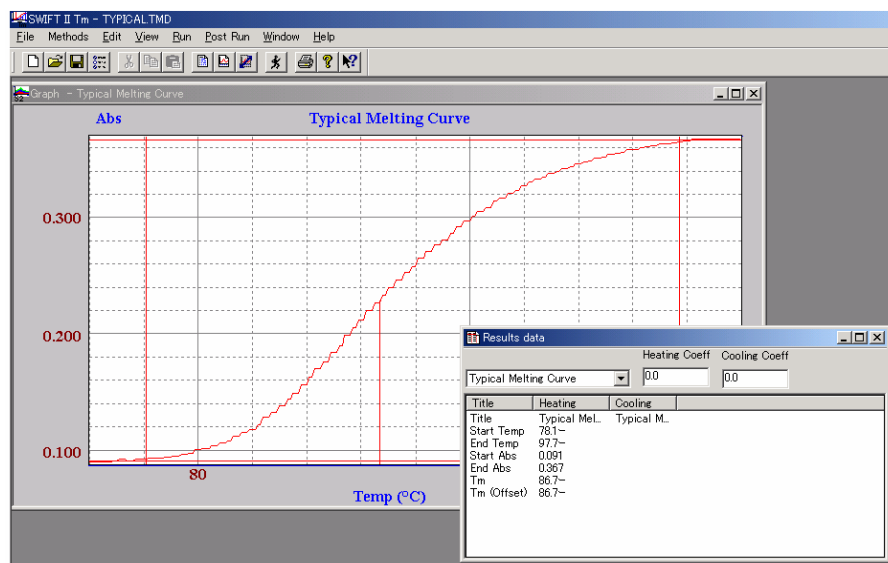



Figure.201－測定例

10.7.2 Derivative（微分）

解析データを一次微分します。設定後、OK ボタンを押すと Derivative ウィンドウが表示され、結果は自動的にオリジナルデータ上にオーバーレイされます。

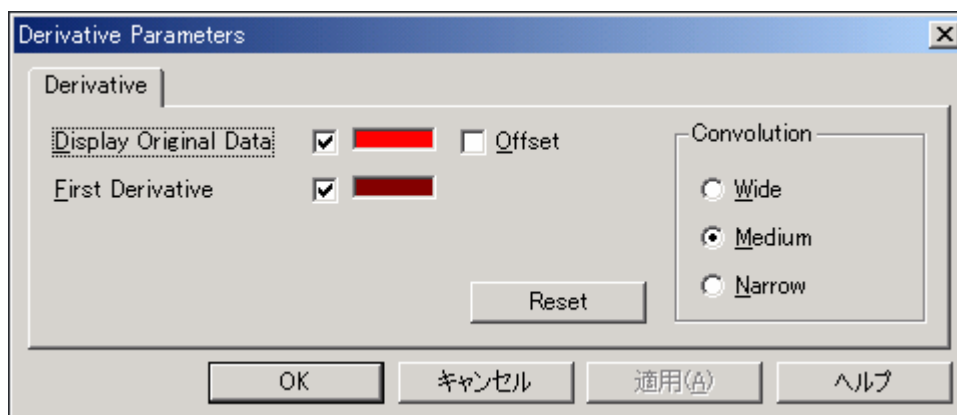



Figure.202－微分解析設定画面

Display Original Data　　　オリジナルデータの表示の有無を選択します。

First Derivative　　一次微分データの表示の有無を選択します。

Offset　　オリジナルデータから一次微分の結果を差し引きます。

Convolution (Wide, Medium, Narrow)　たたみ込みの設定をします。

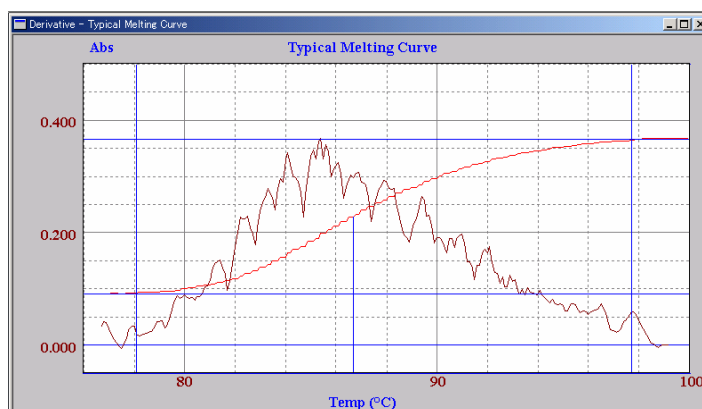



Figure.203－微分解析結果表示例

10.7.3 Smoothing（スムージング）

選択したデータにスムージング機能を適用します。

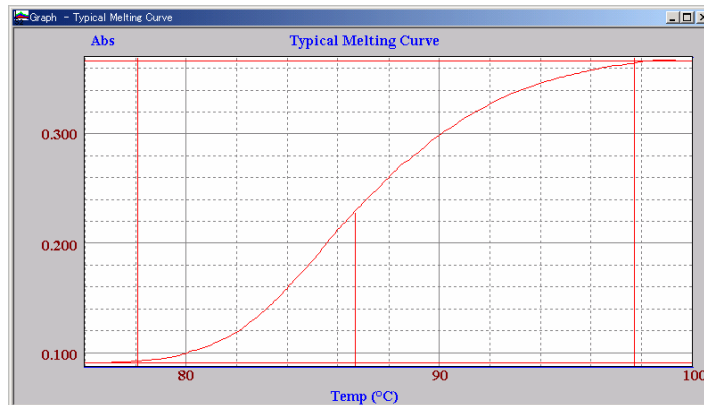



Figure.204－スムージング処理例

10.7.4 Trace（トレース）

データ上でマウスをロックし、細十字線のポイントを移動してデータ値を確認できます。

データ値は SWIFT アプリケーションウィンドウの左下に表示されます。

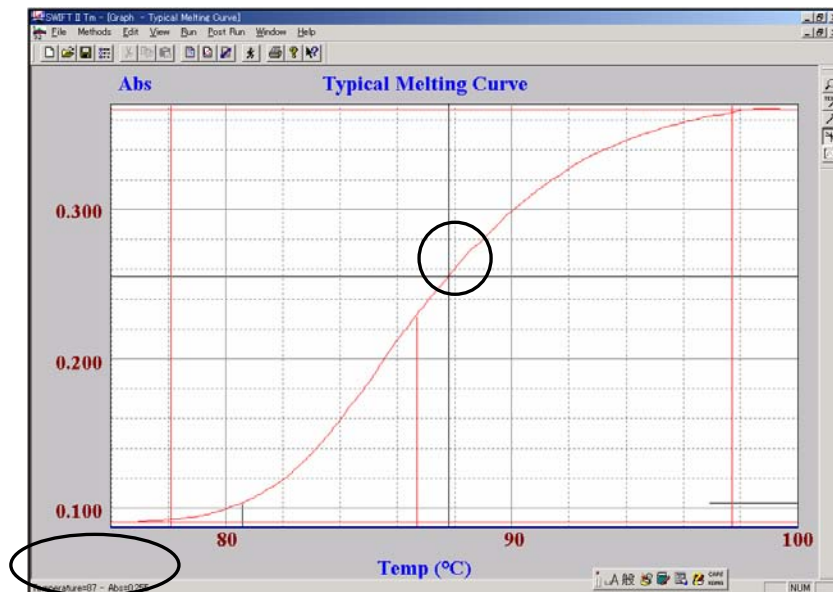



Figure.205－Trace（トレース）例

10.8Window（ウィンドウ）

Cascade　全てのビューを順に重ねて表示します。

Tile　　ディスプレイ上で見える全てのビューを並べて、メインウィンドウに全て表示し

ます。

Arrange Icons　　メインウィンドウの下部に全てのアイコンを並べます。

10.9Help（ヘルプ）

Using Help　　　ヘルプ機能の使い方を説明します。

Index　　ヘルプ機能のインデックスを表示します。

About　　製作者の情報を表示します。

11　菌培養液濁度測定

11.1　はじめに

特定の波長、もっぱら 600nm が多いのですが、分光光度計を用いて菌の増殖度合いを見積もったり増殖曲線を描いたりすることがよく行われます。SWIFT-II ソフトウエアの Culture アプリケーションは、増殖の度合いが異なるサンプルでも測定データを自動的に保存できますので、あとからの確認が簡単にできます。また、菌の培養で誘導をかけた場合と誘導をかけない場合などの比較データを同一のグラフ上に表示したりすることもできます。また、他の解析に用いるためにデータはエクセル形式で保存・移動させることも可能です。

菌の培養はたとえば500ml培養フラスコで行い、その1mlをモニター用に使用します。ご注意いただきたいのは、菌培養液のようなにごったサンプル測定では、分光光度計での測定であっても吸光度を測定しているわけではありません。測定値は、検出器に入る散乱光の割合であって、分子の吸光によるものではありません。そのため、測定結果は分光光度計の光学測定系に依存します。同一サンプルを異なる分光光度計で測定した場合に、同じ結果が得られるとは限りません。必要なら用いる分光光度計で、実際の菌体数と吸光度の関係を測定し、較正することをお奨めします。

このアプリケーションでは Common Menu Descriptions の章（3.3）に記述されているメニューを使用します。若干異なる部分は、直接データを操作する Post Run Menu オプションです（右図）。

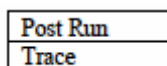



Figure.206－ポストランメニュー

11.2Culture Parameters（菌培養液濁度測定パラメータ）

パラメータの設定は、4 ページに分割されています。Parameter sheet を開けると、状況に応じてこれらのページがいくつかまたはすべてが表示されます。新規作成（New）をクリックすると、設定画面が開きます。

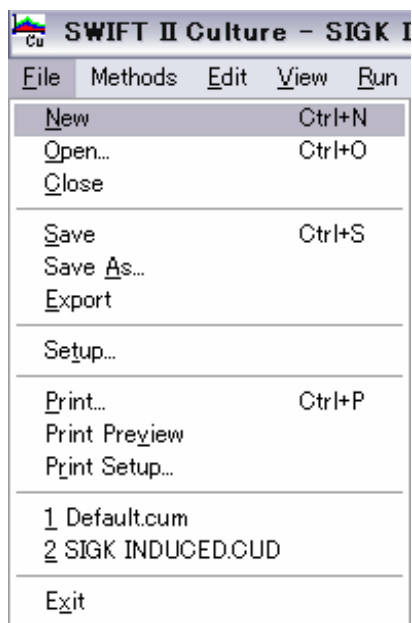



Figure.207－New の選択

測定結果がある場合(データを Open した場合)、パラメータは確認専用で、設定内容の確認は可能ですが、変更することはできません。

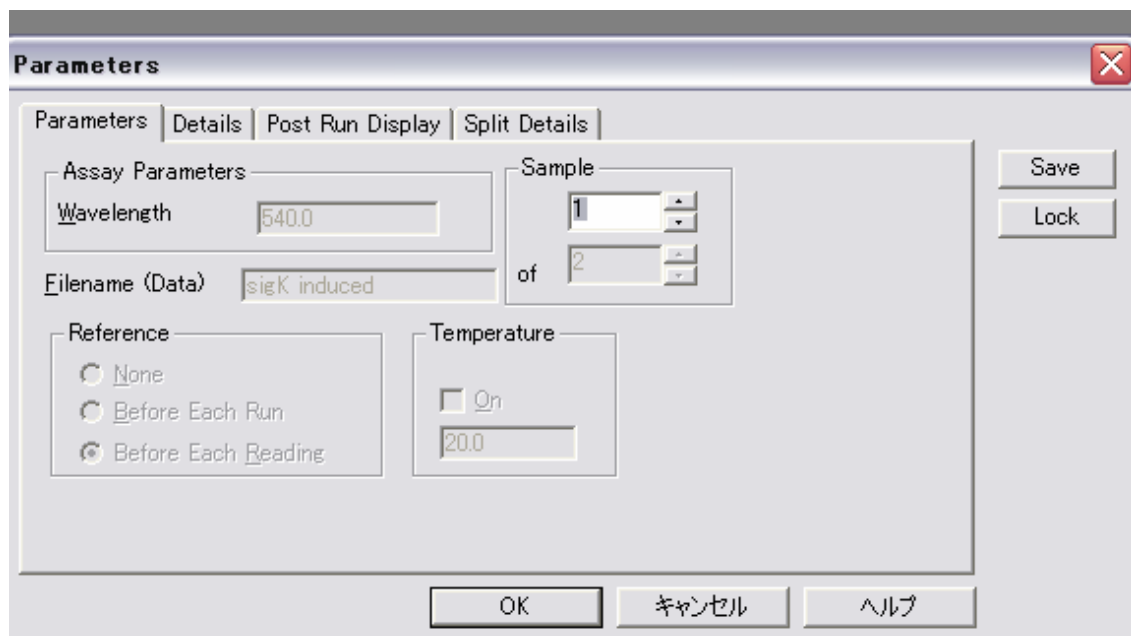



Figure.208－パラメータ確認画面

11.2.1 Parameters Page(パラメータページ)

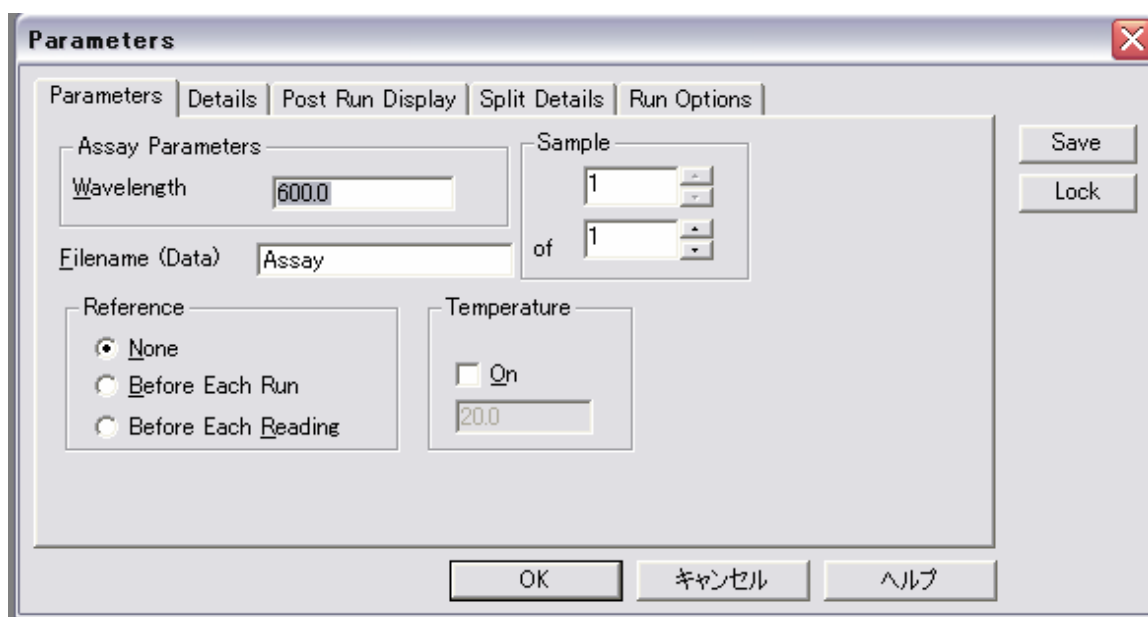



Figure.209ーパラメータ設定画面

Wavelength(s)　　アッセイ時の波長を設定します。

Sample　いくつのサンプル（最大 24）を測定するか入力します。例えば 3 サンプルを異なるパラメータで測定する場合、n of N の N を 3 に設定し、1、2、3 のパラメータをそれぞれ入力してください。Details とあわせて設定します。

Filename(Data)　　データを保存するファイル名を作成します。

References　リファレンス測定をしない、測定開始時、またはすべての測定前に行うから選択します。

Temperature　　ペルティィエ装置の使用／不使用の選択と作動温度の設定をします。

11.2.2 Details Page(詳細ページ)

Figure.210－詳細入力画面

このページではユーザー情報を設定します。（必須ではありません。）

Title　　グラフに表示するタイトル

Operator オペレータ名

Comments　　適用する備考

Assay　個々のパラメータを見ることができます。

Filename ファイル名。パラメータ画面で設定・入力したファイル名に時刻と日付が自動的に付加された名称が作成されます。

Enabled　　チェックが入っている場合だけ、上記設定が可能になります。

Update all assays　チェックすると、全サンプルに共通の詳細が設定できます。

パラメータ設定画面で入力した Assay 数だけ、Assay の番号が表示できます。サンプル番号を変更することにより、個別情報を変更し、各アッセイをカスタマイズすることができます。Update all assays にチェックが入っている場合はすべて共通なので各アッセイの情報は変更できなくなります。

11.2.3　Split Details Page

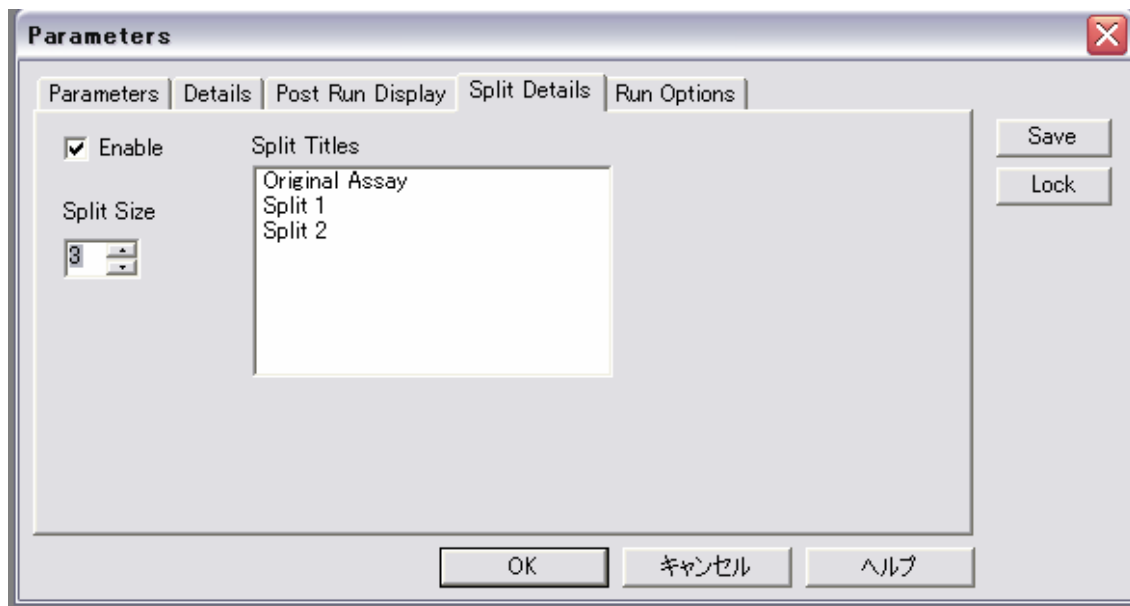



Figure.211－Split Details 入力画面

Split Size Original Assay を含めた Split データの総数

Split Titleデフォルトでは Original Assay、Split　1,2,･･となりますが、必要に応じて変更できます。

11.2.4　Run　Option

このページは測定が完了した後、自動的に実行する操作を設定します。ここで設定していなくても、必要な情報や、データは測定後の Post　Run で設定･確認･印刷等行えます。

以下のオプションがあります。

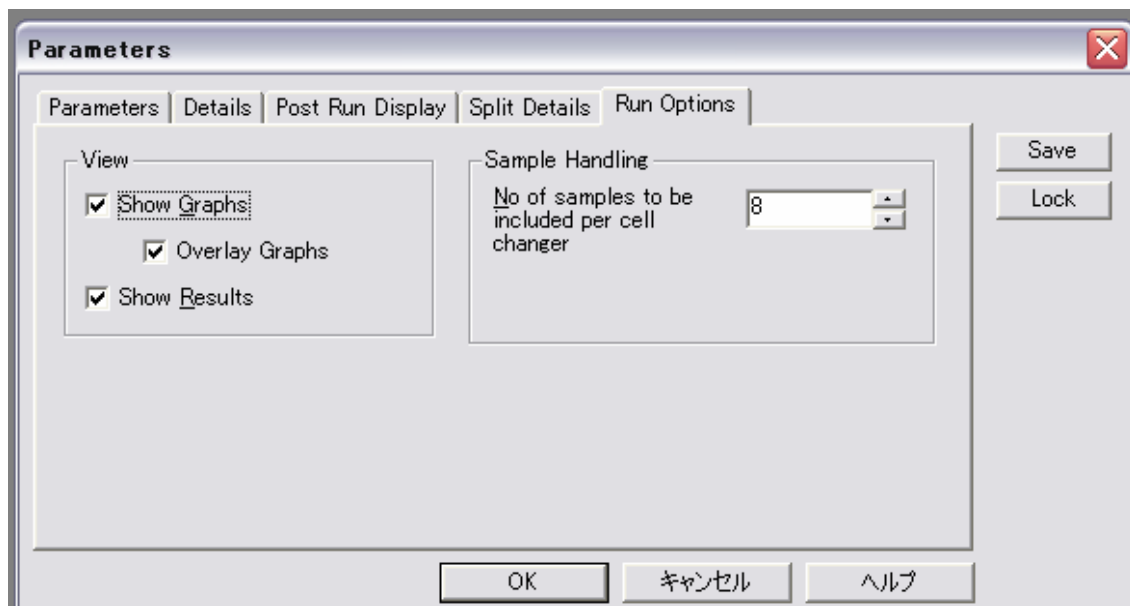



Figure.212ーランオプション設定画面

View　測定終了後、グラフの表示を行うか、重ねがきするか結果の表示をするかを選択します。

Sample Handling　セルチェンジャー使用時、いくつのセルを使用して測定するかを入力します。

11.3　Post Run　Display（測定データの表示形式）

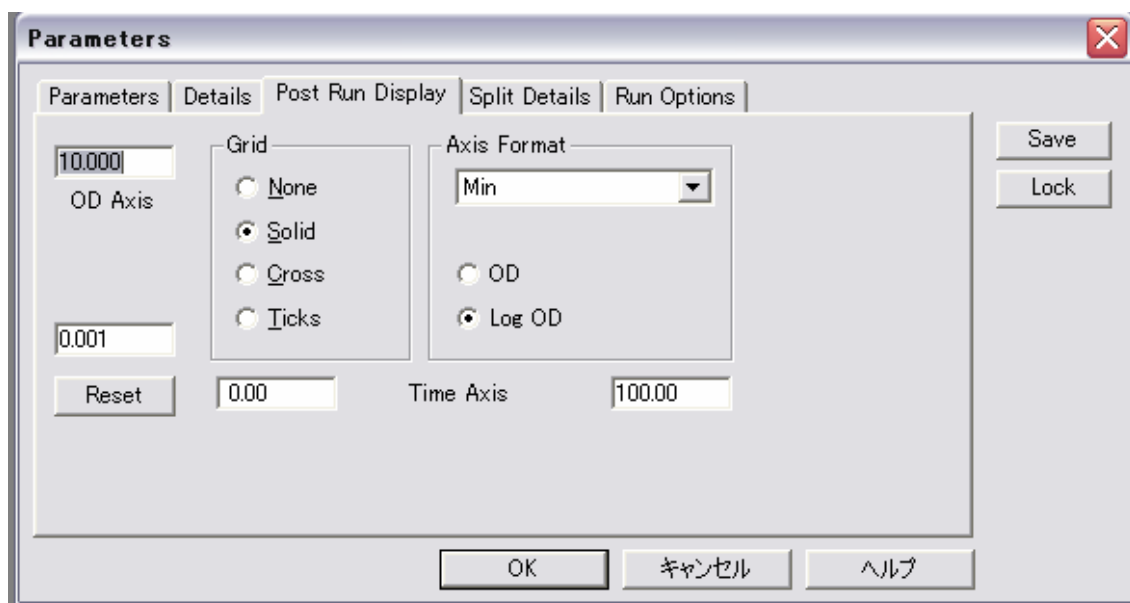



Figure.213－ポストランオプション設定画面

測定結果の表示で、グラフの設定を行います。縦軸、グリッドおよび横軸の時間表示を選択設定します。これは測定データを呼び出した時にも View＞Display で変更可能です。

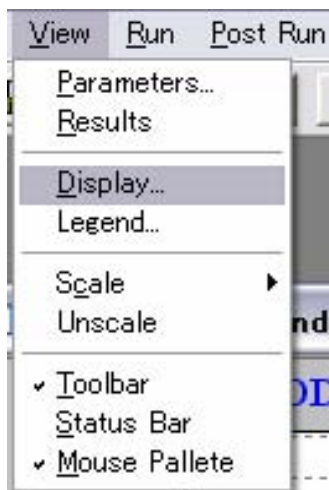



Figure.214－Display 呼び出し

11.4　Culture Data（測定データ）

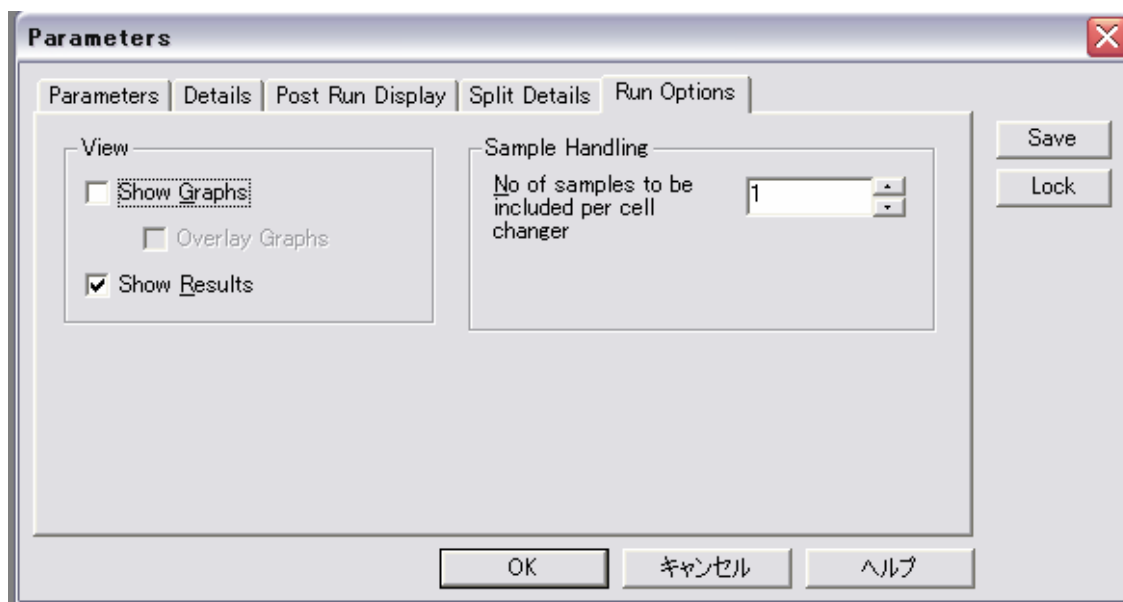



Figure.215－結果表示設定画面

測定結果は時間とそのときの測定値として記録されます。パラメータ設定画面の Run Option 画面で、Show Graphs にチェックが入っていれば測定結果はグラフとともに表

示されます。測定後は必要に応じて各データを確認することができます。

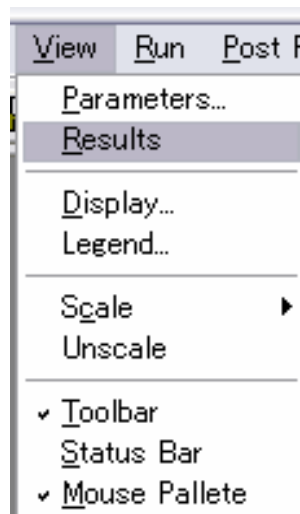



Figure.216－Result 呼び出し

View＞Results をクリックするとデータ画面が現れます。

Results data

Time Base: Auto select　Factor: 1.000　Units:

sigK-IPTG

No.	Time (hh:m...	Factor	Abs	Result
1)	0:00	1.000	0.418	0.4176
2)	0:20	1.000	0.545	0.5448
3)	0:48	1.000	0.778	0.7778
4)	1:32	1.000	1.029	1.0285
5)	1:59	1.000	1.321	1.3207
6)	2:09	1.000	1.324	1.3239
7)	2:39	1.000	1.454	1.4541
8)	3:16	1.000	1.480	1.4801
9)	4:11	1.000	1.477	1.4772
10)	4:50	1.000	1.487	1.4872
11)	5:22	1.000	1.475	1.4751

Figure.217－結果表示例

11.5　Culture Run（測定の実施）

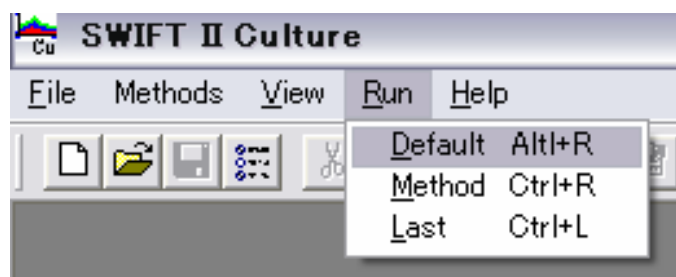



Figure.218－Run の選択

Run をクリックすると、Default、Method および以前測定したことがあれば Last の選択が可能になります。Default を選択すると、パラメータ設定画面になります。各パラメータを入力して測定します。

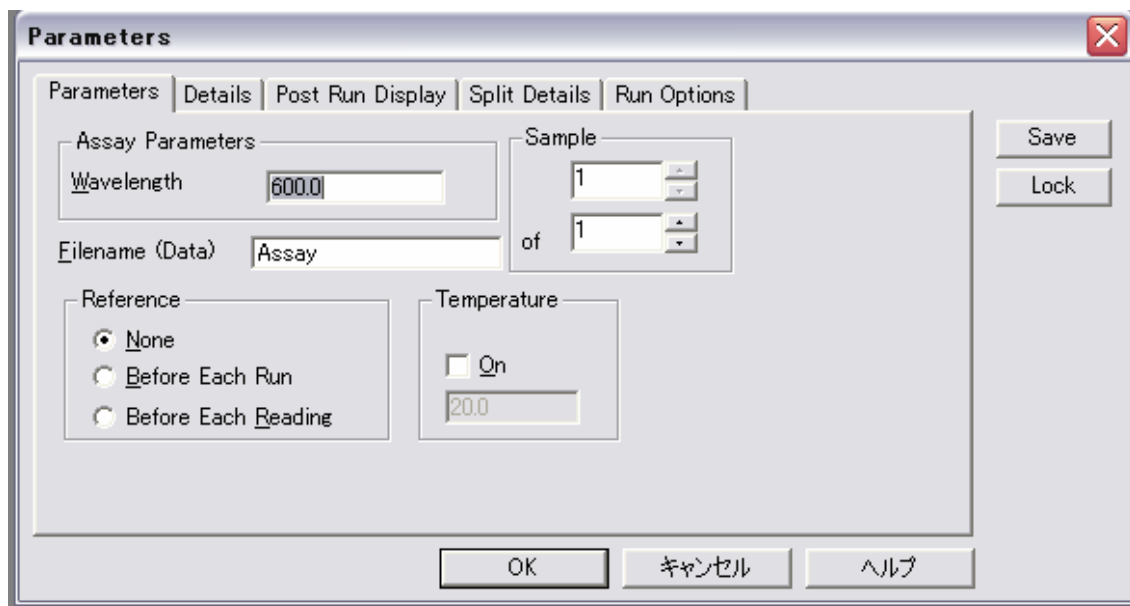



Figure.219－パラメータ設定画面

Method を選択すると、Method 選択画面になります。必要な Method を選択して、開くをクリックするとパラメータの確認画面が開きますので、OK をクリックします。

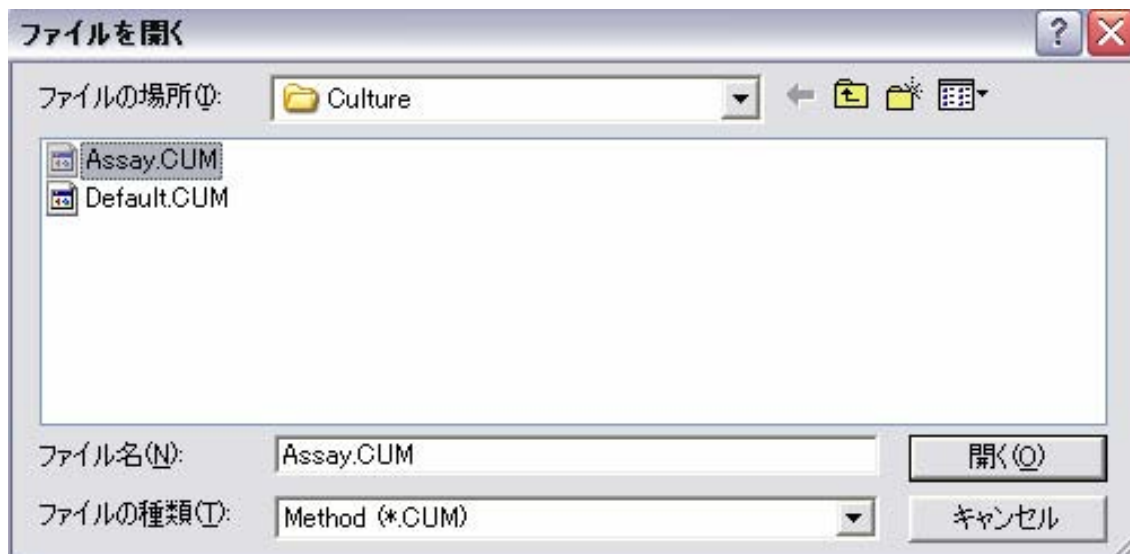



Figure.220－メソッド呼び出し

Last を選択すると、前回測定した内容でパラメータ設定画面が現れますので、内容を確認して測定を開始します。

11.5.1 測定

続いて Dialog Box が開きますので、測定内容が正しいか確認して、OK をクリックします。

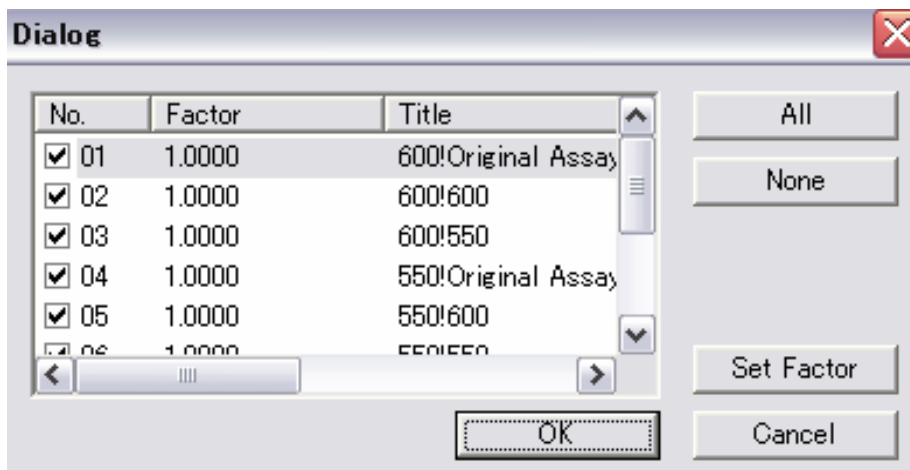



Figure.221－Dioalog

マルチセルチェンジャーを使用している場合には、各セル位置の情報が表示されますので、確認して OK を押すと測定が開始します。

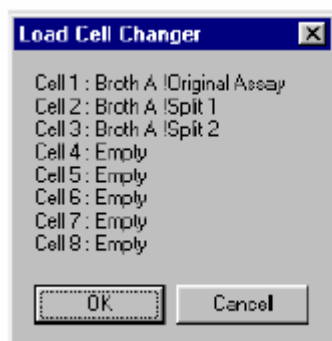



Figure.222－マルチセルチェンジャー装着時の確認画面

Figure.223－Run>Method 選択

一回の測定が終了するとデータが表示されます。培養状況を確認しながら、次の測定を行う場合には、Run＞Method をクリックします。電源を切ったあとに同じ Method を行う場合には、Method 呼び出し画面が現れますので、選択するか、Last で前回の Method を呼び返すこともできます。

また、Split 処理をせずに測定した場合には、次回の測定を行う場合に Split 処理するかどうかの選択ができるようになります。

測定が開始されると、Data Box とグラフ画面が表示されます。

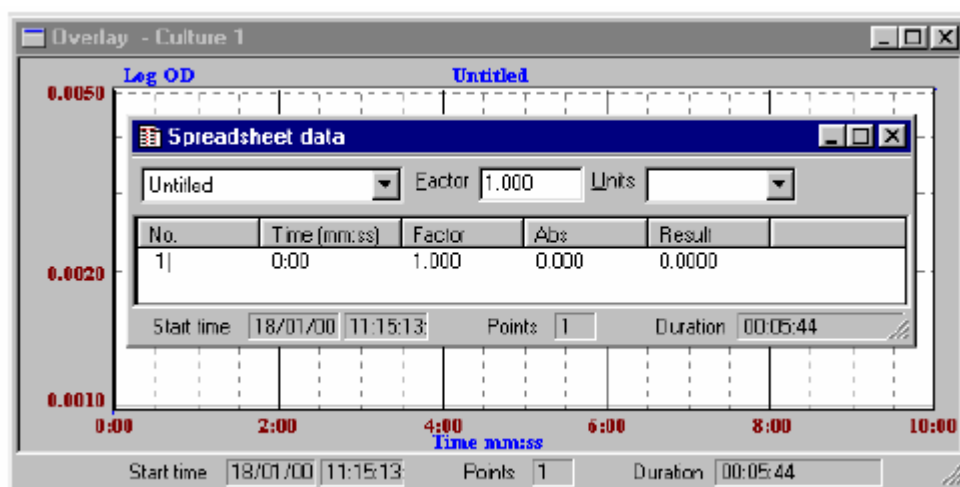



Figure.224－実行中結果表示例

11.5.2 Split （サンプルの分割測定）

培養状況などで、同一サンプルを再度希釈して測定したデータをとりたい場合に使用します。

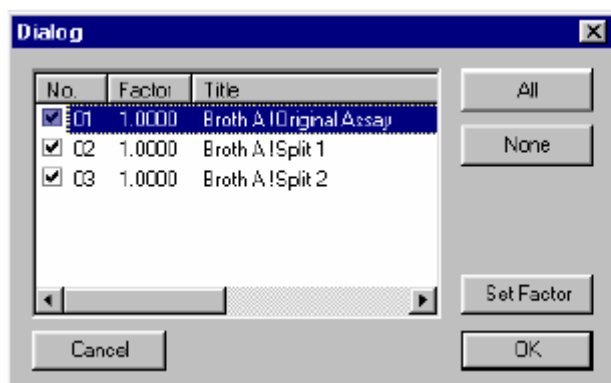



Figure.225－Split 選択時の画面表示例

Split を選択すると、もとのサンプル系列に設定した Split の数だけデータ名が追加され、それらを測定することができます。各サンプル系列に適当な Factor を掛けることもできます。

11.5.3 Close (終了)

Figure.226－Close の選択

は一連の測定を終了する場合に使用します。Close で終了しない場合、ファイルを閉じたり、他のアプリケーションを使ったりしても、スタート時間が記憶され、次回の測定はその時間経過後という内容で測定されます。